



Université
de Toulouse

THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par :

Institut National Polytechnique de Toulouse (INP Toulouse)

Discipline ou spécialité :

Dynamique des fluides

Présentée et soutenue par :

M. JEAN-PHILIPPE ROCCHI

le vendredi 12 septembre 2014

Titre :

SIMULATIONS AUX GRANDES ECHELLES DE LA PHASE D'ALLUMAGE
DANS UN MOTEUR FUSEE CRYOTECHNIQUE

Ecole doctorale :

Mécanique, Energétique, Génie civil, Procédés (MEGeP)

Unité de recherche :

CERFACS (CERFACS)

Directeur(s) de Thèse :

MME BENEDICTE CUENOT

M. ANTOINE DAUPTAIN

Rapporteurs :

M. DENIS VEYNANTE, ECOLE CENTRALE PARIS

M. OLIVIER COLIN, INSTITUT FRANCAIS DU PETROLE (IFP)

Membre(s) du jury :

Mme CHRISTINE ROUSSELLE, UNIVERSITE D'ORLEANS, Président

Mme BENEDICTE CUENOT, CERFACS, Membre

À Sophie,

Remerciements

*La vie, ce n'est pas d'attendre que l'orage passe,
c'est d'apprendre à danser sous la pluie" [Sénèque ?]*

Voilà tout ce que j'aurais du savoir avant de commencer cette épreuve (en plus du [Poinsot and Veynante, 2001], du [Williams, 1985] et du [CERFACS, 2009] ...), mais je suis finalement arrivé au bout ! Malgré de nombreux orages, j'ai tout de même appris à danser, et je le dois à de nombreuses personnes. J'en oublierai forcément, j'espère qu'ils ne m'en voudront pas trop.

Je remercie les rapporteurs du jury, Olivier Colin et Denis Veynante, pour avoir été forcé de lire mon manuscrit en entier, et surtout merci Denis Veynante d'avoir fait un détour pendant ses vacances pour aller le récupérer au labo. Je remercie la présidente du jury, Christine Rousselle, pour avoir aussi lu mon manuscrit en entier et avoir apporté un oeil différent sur ce travail.

Je remercie la Snecma Vernon de m'avoir permis de travailler sur un sujet aussi intéressant et de l'avoir financé dans le cadre d'une convention CIFRE malgré son caractère confidentiel. Je remercie au passage Didier Saucereau et Marie Theron, pour leur suivi et leur bonne humeur.

Je remercie Thierry Poinsot de m'avoir accepté dans l'équipe CFD et les seniors (Antoine, Laurent, Olivier, Eleonore, Gab') pour leur aide tout au long de la thèse.

Je souhaite en particulier remercier ma directrice de thèse Bénédicte Cuenot : Je n'ai pas été très facile, alors merci de m'avoir supporté et surtout merci de m'avoir poussé à aller au bout de ce travail.

Je remercie la CSG team pour leur support et leur disponibilité légendaire.

Je remercie notre administration Chantal et Michèle pour leur bonne humeur à toute épreuve, ainsi que notre secrétaire de choc Marie.

Je remercie les nombreuses rencontres au labo au cours de cette thèse : Les très anciens (Kerstin, Matthias, Matthieu, Jean Matthieu, Pierre, Gab' (oui, t'es en double, mais tu le mérites !)), les moins anciens (Greg (de rien pour ton compte FB), Antho (de rien pour la veille de ta soutenance), Thomas, Alex, Patri (merci de nous avoir fait attendre dehors dans le froid pendant que tu galochais un certain petit français), Victor (de rien pour le volley), Beni, JB, Elsa & Bubu, Camilito, Stephan the cobureau, Davidator, Geoffy.ch@usson.net...), les plus jeunes (Damien, Sandrine, Raph', Corentin, Lucas, Abdulla, Pierre, fillot Joris ...), et même des visiteurs (Pierre, Pec, Alireza).

Merci à tous les volleyeurs de la météo pour les soirées, et en particulier aux Rastas (Bibo, Ced', SamSam, petit Fred, David, Guillaume, Stephane, Thanh Tu) pour m'avoir fait participer à une année de match totalement énorme !!

Balance Man !
Cadence Man !
Frappe la balle !
C'est du volley ball Man !
COOOOOOL RAAASTAAAAAAA !

Merci à mes vieux topains d'être comme ils sont : KMI, Bubu, Trollet, Jacko, Thos, FL, Gérard, Méla, l'Abeille, Galou ...

Merci aux MMK de m'avoir gardé malgré mes annulations de weekend de dernière minute : Jess, Thom, Bastien (et Aurélie), Bender, Nono, mes bisounours, Maxou (et Nath), Zavou, Blox (et Carole) ...

Je remercie les gens de la danse, tout(e)s mes partenaires de danses qui m'ont permis de voyager le temps d'une chanson, à mes 14 points en Novice, à ce Pro-Am improbable, à Steph', à la team élargie de Salsa Virus (HLM, maitre Jang, Mel', Jenny, Fab', Sylvie, Natash'moi, Patou, Silvia, P'tit Agnal ...) et en particulier la team encas danse : Nico, Mag, Sandy, LuLu, Aflex, Juanita, Tuannh et Gaetan. Merci pour tous ces moments de bonheur et cette aventure qu'on a pu partager.

Je remercie ma maman et ma soeur pour leur soutien à distance. Merci à la "nouvelle" famille pour son accueil : Chantal, Serge, Céline, mon Fan number one, François, Cécile.

J'ai gardé la meilleure pour la fin :

Et surtout, un GRAND MERCI à ma Super Paupiette pour m'avoir supporté à distance, et soutenu dans les moments de doute. Je t'aime.

Résumé

À ses débuts, la conquête spatiale a pu bénéficier des rivalités politiques de la Guerre Froide pour se développer rapidement sans réellement se soucier des efforts économiques à fournir. Aujourd'hui, de nombreux pays subissent le revers de la médaille de cette course effrénée : pour maintenir une flotte de lanceurs viable économiquement, les différentes agences spatiales doivent faire face à un dilemme opposant la minimisation des coûts de lancement à la maximisation de leur fiabilité. Dans cette logique d'optimisation, les industriels présents dans ce processus de réflexion se tournent vers la simulation numérique pour tenter d'améliorer leurs connaissances des technologies existantes, en particulier sur les zones d'ombres inaccessibles aux mesures expérimentales. Dans la lignée de plusieurs études théoriques et expérimentales, ces travaux visent à apporter un éclairage nouveau sur les phénomènes se produisant lors de l'allumage d'un moteur fusée cryotechnique.

Ces recherches se tournent dans un premier temps vers l'amélioration de la modélisation de la flamme H_2/O_2 . La validation d'une cinétique chimique réduite initialement destinée à la combustion H_2 /Air permet de justifier son utilisation lors de l'allumage. Puis, le développement d'un modèle de combustion turbulente pour le régime de flamme de diffusion est mené dans le but de palier aux limitations du modèle de flamme épaissie. Enfin, une analyse du cas où les régimes pré-mélangés et non-prémélangés sont présents tous les deux permet d'étudier un moyen simple de les distinguer même dans le cas où ils sont très proches.

Dans un second temps, ces travaux se tournent vers l'étude de l'allumage dans un moteur fusée cryotechnique. Après avoir analysé de manière globale le calcul d'une séquence simplifiée, deux études plus approfondies sont menées pour investiguer, d'une part, les différents régimes de combustion, et d'autre part, les différents modes de propagation de la flamme propres à cette configuration.

Summary

The beginning of the conquest of space received benefits from the political competition of the Cold War and consequently grow quickly without considering the cost of these advances. The end of this unrestrained technological race brings to light the other side of the coin. In order to keep a fleet of launch vehicles up-to-date with the market, spatial agencies must answer a question : how can the cost of a launch be reduced without decreasing its efficiency. Through the use of numerical simulation, industrial partners may investigate this logic of optimisation. This solution might provide improvement in the knowledge of existing technologies, especially when experimental measurements are impossible. Following the path of theoretical and experimental results, this study aims to present a new view about the different processes occurring during the ignition of a space rocket engine.

First, this research will present an improvement of the modelling of H_2/O_2 flame. The validation of a reduced chemical scheme basically developed for H_2/Air will justify its use during the ignition sequence. Then, a turbulent combustion model for non-premixed flames will be developed in order to compensate the limits of the thickened flame model implemented in AVBP. Additionally, a study of both premixed and non-premixed regimes in a closed position will bring a simple method to distinguish them for a further active use.

Secondly, this research will study the ignition process of a representative cryogenic space rocket chamber. The calculation of a simplified ignition sequence will be globally investigated. Finally, two-detailed analysis will lead to different combustion regimes and flame spreading processes.

Table des matières

Remerciements	5
Résumé	7
Summary	9
Liste des symboles	13
<hr/>	
Première partie	Introduction générale
<hr/>	
Introduction	19
Chapitre 1	Contexte historique et économique
Chapitre 2	Phénomènes d'allumage et combustion dans une chambre de moteur fusée cryotechnique
Objectifs et structure de la thèse	69
<hr/>	
Deuxième partie	Modélisation de la combustion turbulente dans les chambres de moteurs fusées
<hr/>	
Introduction	73
Chapitre 3	Equations et modélisation de la combustion turbulente

TABLE DES MATIÈRES

Chapitre 4	Cinétique chimique	95
Chapitre 5	Modélisation de la combustion turbulente	131
Chapitre 6	Identification du régime de combustion dans les flammes turbulentes partiellement prémélangées	165
Conclusion partielle		181
<hr/>		
Troisième partie Allumage 3D dans une chambre réduite de moteur fusée [CONFIDENTIEL]		183
<hr/>		
Introduction		185
Chapitre 7	Calcul 3D d'allumage rapide [CONFIDENTIEL]	187
Chapitre 8	Différents régimes de combustion [CONFIDENTIEL]	189
Chapitre 9	Mécanismes de propagation de flamme [CONFIDENTIEL]	191
Conclusion partielle		193
<hr/>		
Conclusion générale et perspectives		197
<hr/>		
Liste des références bibliographiques		199
<hr/>		
Annexes		215
<hr/>		
Chapitre A	Conditions limites pour l'injection gazeuse	215

TABLE DES MATIÈRES

Chapitre B	Etude préliminaire de la problématique de l'allumage [CONFIDENTIEL]	219
Chapitre C	Etude de l'influence du confinement [CONFIDENTIEL]	221
Chapitre D	Séquence d'allumage [CONFIDENTIEL]	223
Chapitre E	Caractéristiques géométriques de la configuration étudiée [CONFIDENTIEL]	225
Chapitre F	Calcul M8.1 [CONFIDENTIEL]	227

Liste des symboles

Lettres romaines

$[X_k]$	Concentration molaire de l'espèce k
\dot{m}	Débit massique
Q_j	Taux d'avancement de la j-ème réaction
A	Constante pré-exponentielle de la loi d'Arrhénius
c	Célérité du son
C_p	Capacité calorifique à pression constante
D	Diamètre injecteur
d	Diamètre de goutte
D_k	Coefficient de diffusion de l'espèce k
D_{th}	Coefficient de diffusion thermique
E	Efficacité
E	Énergie totale non-chimique (chap. 3)
e_t	Énergie totale
F_d	Force de trainée
f_{kj}	Force volumique sur l'espèce k dans la direction j
h_s	Enthalpie sensible

J	Rapport des flux des quantités de mouvement
l_D	Épaisseur de diffusion de la flamme non-prémélangée
l_R	Épaisseur de réaction de la flamme non-prémélangée
l_t	Échelle intégrale
n_L	Nombre de goutte dans la phase Eulérienne
P	Pression
q_i	i-ème composante du flux d'énergie
$q_{s,i}$	Flux d'énergie non-chimique
R	Constante des gaz parfaits ($R = 8,314 J/mol/K$)
s	Rapport de masse à la stœchiométrie
s_L^0	Vitesse de flamme prémélangée laminaire
s_T	Vitesse de flamme prémélangée turbulente
T	Température
t	Temps
U	Vecteur vitesse

TABLE DES MATIÈRES

u'	Fluctuation de vitesse	∇	Opérateur nabla
u_i	i-ème composante du vecteur vitesse	ν	Viscosité cinématique
V_k	Vitesse de diffusion de l'espèce k	ν_F, ν_O	Coefficients stœchiométriques du fuel et de l'oxydant
V_k^c	Vitesse de correction de l'espèce k	Φ	Richesse du mélange
W	Masse molaire moyenne du mélange	Φ_g	Richesse globale de la masse injectée dans la chambre
W_k	Masse molaire de l'espèce k	ρ	Masse volumique
X_k	Fraction molaire de l'espèce k	σ	Tension de surface
Y_k	Fraction massique de l'espèce k	σ_{ij}	Tenseur des contraintes visqueuses
z	Fraction de mélange	τ_c	Temps caractéristique de la chimie
C-X	X-ème couronne	τ_e	Temps caractéristique de l'évaporation
C-X-Y	Y-ème injecteur de la X-ème couronne	τ_{fl}	Temps caractéristique de l'écoulement basé sur χ_{st}
Lettres grecques		τ_K	Temps caractéristique de l'échelle de Kolmogorov
α_l	Fraction volumique de liquide	τ_m	Temps caractéristique de de la structure turbulente d'échelle r et de vitesse $u'(r)$
χ	Taux de dissipation de scalaire	τ_t	Temps caractéristique de l'échelle intégrale
$\Delta h_{f,k}^0$	Enthalpie standard de formation de l'espèce k	ζ	Indice de Takeno
δ_L	Épaisseur de diffusion de la flamme laminaire prémélangée	Nombres sans dimension	
δ_r	Épaisseur de réaction de la flamme laminaire prémélangée	B_M	Nombre de Spalding de masse
δ_{ij}	Symbole de Kronecker	B_T	Nombre de Spalding de température
η_K	Échelle de Kolmogorov	Da	Nombre de Damköhler basé sur le temps caractéristique de l'échelle intégrale de la turbulence
Γ	Fonction d'efficacité (Sec. 5.3.2)	Da^{fl}	Nombre de Damköhler basé sur le temps caractéristique τ_{fl}
Γ	Taux d'évaporation	Da_e	Nombre de Damköhler d'évaporation
κ	Étirement		
λ	Coefficient de conduction thermique		
λ_{rt}	Longueur d'onde de l'instabilité de Rayleigh-Taylor		
μ	Viscosité dynamique		

Ka Nombre de Karlovitz

Le Nombre de Lewis

M Nombre de Mach

Nu Nombre de Nusselt

Oh Nombre de d'Ohnsorge

Pr Nombre de Prandtl

Re Nombre de Reynolds

Re_l Nombre de Reynolds de goutte

Re_t Nombre de Reynolds turbulent

Sc Nombre de Schmidt

Sh Nombre de Sherwood

We_D Nombre de Weber

Indices

0 Relatif à un état de référence

1 Relatif aux gaz frais

2 Relatif aux gaz brûlés

∞ À une distance infinie de la goutte

ext Relatif à l'extinction

F Relatif au fuel

f Sens direct d'une réaction

g Relatif à la phase gazeuse

inj Relatif à l'injection

$interface$ À l'interface de la goutte

K Relatif à l'échelle de Kolmogorov

l Relatif à la phase liquide

max Valeur maximale

O Relatif à l'oxydant

r Sens inverse d'une réaction

st Stœchiométrie

Abréviations

AEQS Approximation des États Quasi-Stationnaires

DNS Direct Numerical Simulation

DTFLES Dynamic TFLES

LES Large Eddy Simulation

LW Lax-Wendroff

MPI Message Passing Interface

NP Non Prémélangée (chap. 6)

P Prémélangée (chap. 6)

PDF Probability Density Function

RANS Reynolds Averaged Navier-Stokes

SGE Simulation aux Grandes Échelles

SGS Sub-Grid Scale

TFLES Thickened Flamme model for LES

TTGC Two-step Taylor-Galerkin Colin

TABLE DES MATIÈRES

Première partie

Introduction générale

Introduction

Ces travaux de thèse portent sur la phase d'allumage d'un moteur fusée cryotechnique fonctionnant à l'hydrogène et à l'oxygène liquide. Ils s'inscrivent dans une suite de thèses autour de cette technologie au CERFACS en collaboration avec SNECMA (Dabireau [Dabireau, 2002], Dauplain [Dauplain, 2006], Lacaze [Lacaze, 2009], Schmitt [Schmitt, 2009], Ruiz [Ruiz, 2012]) et ont pour but d'apporter de nouveaux éléments de réponse, notamment sur des configurations complexes difficilement éligibles aux mesures directes. Afin de pouvoir mieux comprendre les motivations de ces travaux, le Chap. 1 les replacera dans leur contexte historique et économique. Puis, le Chap. 2 s'appuiera sur les problématiques scientifiques relatives aux technologies actuelles pour faire un état des connaissances concernant l'allumage et la combustion dans une chambre de combustion cryotechnique.

Contexte historique et économique

Introduction

Les origines de l'astronautique peuvent être compliquées à définir, tant cette science dépend d'une multitude de sciences. On choisit ici de décrire ces origines dans différents pays ayant réussi à mettre un satellite en orbite. Puis, on retracera l'historique des progrès scientifiques et techniques jusqu'à l'état du marché actuel des lanceurs spatiaux. Ce bilan permettra de mettre en avant les contraintes économiques qui poussent à de nouvelles améliorations dans le domaine de la propulsion spatiale. La technologie de pointe actuelle de la propulsion spatiale, le moteur fusée cryotechnique, sera alors présentée afin de décrire les différentes problématiques scientifiques associées.

1.1 La conquête spatiale dans le monde

La définition de la conquête spatiale a évolué au fur et à mesure des défis technologiques résolus par les scientifiques. L'aspect moderne de cette conquête a été initié par les travaux de Tsiolkovski (Fig. 1.1) après la révolution de 1917, mais a réellement trouvé une application entre la 1ère et la 2ème guerre mondiale, lorsque l'Allemagne a orienté ses recherches vers les fusées. A la fin de la 2ème guerre mondiale, les scientifiques allemands sont rattrapés par les vainqueurs et mis à



FIGURE 1.1 - *Constantin Edouardovitch Tsiolkovski, théoricien et précurseur de l'astronautique*

contribution en URSS et aux Etats-Unis^{1 2 3 4}.

1.1.1 L'URSS

L'URSS cherche, dès la fin de l'année 1945, à améliorer le missile allemand V2. Serguey Korolev prend rapidement la tête des opérations de recherche. Après plusieurs essais plus ou moins fructueux, le développement du missile balistique intercontinental R7 débute en février 1953 et utilise comme carburant un mélange de kérosène et d'oxygène liquide. A l'époque, Korolev ne dispose pas d'une technologie assez puissante et choisit de mettre en parallèle deux étages de fusées (Fig. 1.2) alors que la tendance est plutôt de les empiler. Ainsi un moteur RD 108 est associé à 4 moteurs RD 107. Chacun de ces moteurs a la particularité de posséder plusieurs chambres de combustion afin de limiter les efforts sur la structure. Le R7 compte un total de 32 chambres de combustion. Cependant, cette configuration se révèle inadaptée pour une utilisation en tant que missile nucléaire (trop gros pour un lancement en silo, temps de lancement trop long...). En janvier 1956, Korolev propose d'utiliser le missile afin d'envoyer un satellite dans l'espace. Le 4 octobre 1957, l'Union Soviétique place en orbite Spoutnik 1 à l'aide d'un missile R7 reconverti. Fort de ce succès, le premier être vivant est envoyé dans l'espace seulement 1 mois plus tard : la chienne Laïka est mise en orbite à bord de Spoutnik 2, le 3 novembre 1957. La course engagée avec les États-Unis se poursuit en tête jusqu'à la fin des années 60. Malgré des débuts très efficaces, des choix technologiques handicapants ne permettront pas à l'Union Soviétique d'emmener des cosmonautes sur la Lune. La Table 1.1 présente les principaux programmes spatiaux qui voient ensuite

1. <http://lanceurs.destination-orbite.net/> [Philippe,]
2. <http://www.capcomespace.net/> [Capdevila,]
3. <http://space.skyrocket.de> [Krebs,]
4. wikipédia [Wikipedia,]

le jour afin de rester dans la course face aux États-Unis.



FIGURE 1.2 - Photo des tuyères du lanceur R7 en configuration Vostok [Capdevila,]

1.1.2 Les États-Unis

Les États-Unis se lancent dans l'étude des fusées avec un peu de retard, mais reviennent au coude à coude avec l'URSS grâce aux scientifiques allemands. Initialement envisagé en 1954, le projet d'envoi de satellite Orbiter par l'équipe de Von Braun est mis de côté pour un projet dirigé par la Navy. Le 7 décembre 1957, le lanceur de la Navy nommé Vanguard (dérivé des fusées Viking) explose sur son pas de tir. Cet événement restera dans les mémoires sous le nom de "Flopnik". L'équipe de Von Braun qui a continué ses travaux en parallèle propose une solution de secours "clés en main" au lendemain de l'échec. C'est ainsi que les États-Unis placent en orbite le satellite Explorer 1, le 31 janvier 1958, grâce au missile Jupiter C renommé Juno I. Le premier étage de ce lanceur est formé d'un booster Redstone (version améliorée d'un V2) (Fig. 1.3). Les étages sont des assemblages de fusées Sergeant : 11 pour le 2ème étage, 3 pour le 3ème étage et une pour le 4ème étage (Fig. 1.4). A la suite de cette réussite, plusieurs programmes sont créés afin de canaliser les recherches vers certains centres d'intérêt. La Table 1.2 présente les principaux programmes spatiaux des États-Unis.

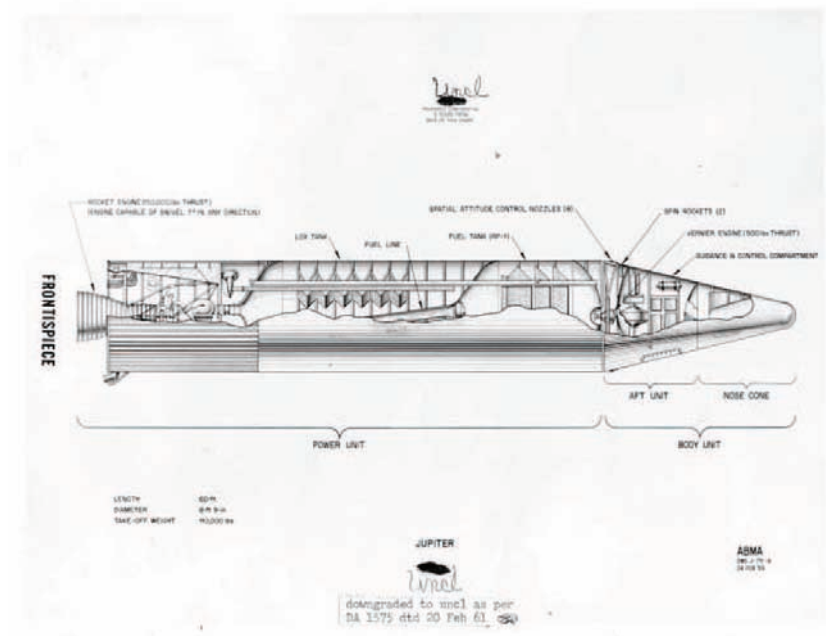


FIGURE 1.3 - Plan de l'étage principal du missile Jupiter C. Source : [Capdevila,]

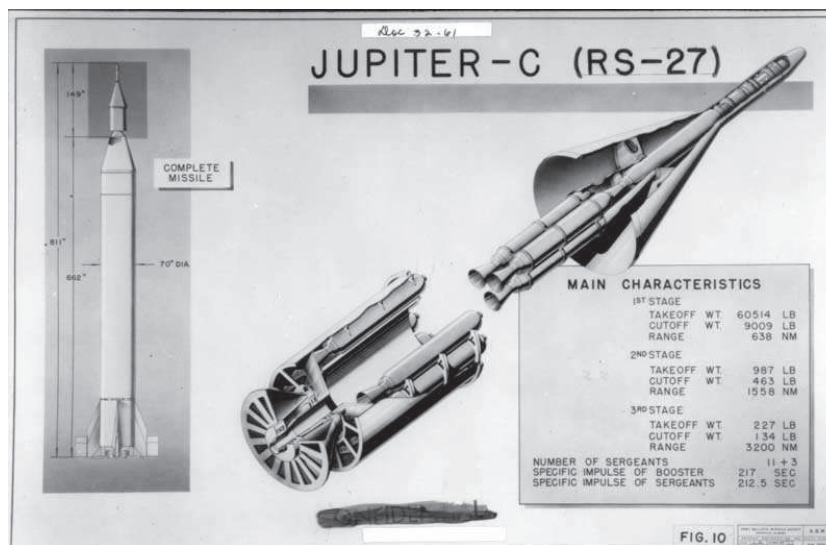


FIGURE 1.4 - Plan des étages supérieurs du missile Jupiter C. Source : [Capdevila,]

1.1.3 La France

La France cherche comme ses concurrents à développer des missiles longue portée, mais se rend compte à son tour que les caractéristiques des missiles qu'elle possède pourraient convenir à un lanceur. En septembre 1961, la décision est prise de créer un lanceur spatial. Le programme des "pierres précieuses" regroupe les premiers essais français dans le domaine des fusées, visant à travailler sur différents points critiques à chaque fusée (Fig. 1.5) :

- Agate : équipements de mesure embarqués et au sol
- Topaze : système de pilotage
- Rubis : troisième étage de Diamant
- Emeraude : premier étage de Diamant
- Saphir : pilotage, séparation premier et deuxième étage, guidage et rentrée atmosphérique

A partir de ces essais, la France envoie le satellite Astérix grâce à la fusée Diamant le 26 novembre 1965 et devient alors la troisième puissance à réussir cet exploit (même si le satellite, endommagé par la séparation de la coiffe, restera muet). Le développement des fusées Diamants (A, B et BP4) prendra fin pour se consacrer aux programmes européens Europa puis Ariane.

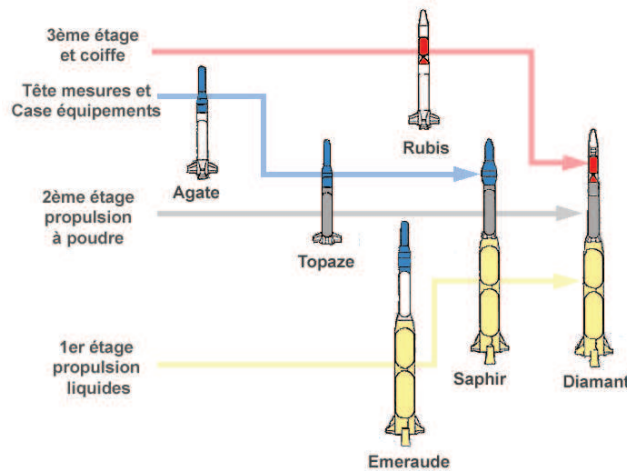


FIGURE 1.5 - Schéma des différents tests des étages du lanceur Diamant à partir des éléments de ses prédécesseurs. Source : [Wikipedia,]

1.1.4 L'Asie, le Moyen Orient et l'Europe

Mis à part la France, il faudra attendre plus de dix années après la mise en orbite de Spoutnik pour voir d'autres pays accéder à l'espace (Tab. 1.3). En Asie, le Japon, la Chine et l'Inde créent des programmes durables qui sont encore présents sur le marché aujourd'hui. Les Corées du Nord et du Sud n'arrivent dans le paysage des mises en orbite que récemment. Au Moyen Orient, Israël puis l'Iran font partie des dernières nation arrivées dans la course. On notera que les motivations des deux Corées ou des pays du Moyen Orient sont liées à une recherche d'indépendance dans l'accès à l'espace. Leur présence n'est donc pas une concurrence sérieuse sur le marché des lanceurs. En Europe, la Grande Bretagne ne réussit qu'une mise en orbite avant de rejoindre d'autres pays sous la bannière européenne.

Programmes / Missions	début - fin	Objectif	Résultats
Luna	1959 - 1976	Étude de la Lune en surface et en orbite.	Luna 3 : Premières photos de la face cachée (4 octobre 1959), Luna 9 : Premier atterrissage (31 janvier 1966), Luna 10 : Première mise en orbite autour de la Lune (31 mars 1966).
Lunokhod	1969 - 1972	Fabrication d'engins mobiles lunaire.	Deux engins parcourent plusieurs kilomètres sur la Lune.
Mars	1959 - 1974	Étude de Mars.	Peu de réussites ⁵
Venera	1959 - 1984	Étude de Venus.	Envoi des premières données atmosphériques de Vénus par la sonde Venera 4 (1967)
Vostok	1961 - 1963	Envoi d'un être humain dans l'espace.	Premier homme dans l'espace : Youri Gagarine (12 avril 1961). Première femme dans l'espace : Valentina Terechkova (6 juin 1963)
Voskhod	1964 - 1966	Embarquement de plusieurs êtres humains dans l'espace, concurrence au programme Gemini en terme de durée de mission.	Premier équipage de 3 personnes (12 octobre 1964), Première sortie dans l'espace : Alexei Leonov (18 mars 1965).
Zond	1964 - 1970	Recueil d'informations sur la Lune, Mars et Venus.	Total de 17 missions : deux annulées, sept échecs au lancement, communications perdues avant le survol de Vénus (Zond 1) et Mars (Zond2).
Bourane	1976 - 1988	Navette spatiale.	Un seul vol non habité (15 novembre 1988).
Mir	1986 - 2001	Station spatiale orbitale.	De nombreuses recherches en micropesanteur.

TABLE 1.1 - Principaux programmes spatiaux et missions spatiales de l'URSS. Source : [(NASA), 2000]

Programmes / Missions	début - fin	Objectif	Résultats
Mercury	1958 - 1963	Envoi d'un homme en orbite autour de la Terre et étude des effets de l'apesanteur.	6 vols habités, 19 non habités, aucun échec, premier américain dans l'espace (Alan B. Shepard, Jr.) le 5 mai 1961.
Pioneer	1958 - 1978	Exploration du système solaire.	Succès des sondes 5, 6 à 9, 10 (étude de Jupiter), 11 (étude de Saturne), Venus Orbiter et Venus Multiprobe (étude de Vénus).
Surveyor	1960 - 1968	Étude de la Lune.	Echec de deux missions sur sept.
Apollo	1961 - 1975	Envoi d'un homme sur la Lune.	Apollo 11 : premiers hommes à marcher sur la Lune (Neil Armstrong et Buzz Aldrin) le 21 juillet 1969.
Gemini	1963 - 1966	Étude de plusieurs techniques spatiales impossibles avec les capsules Mercure.	Sorties extravéhiculaires, rendez-vous spatial, étude des effets de l'apesanteur.
Skylab	1965 - 1979	Mise en service de la première station spatiale.	Utilisation entre 1973 et 1974.
Viking	1975	Étude de Mars en orbite et au sol.	Envoi de deux sondes Viking1 et Viking2. Cartographie de Mars.
Voyager	1977	Étude des planètes hors du système solaire.	Envoi des sondes Voyager 1 et 2.
Navette Spatiale	1968 - 2011	Création d'un véhicule spatial pouvant revenir sur Terre avec un atterrissage contrôlé.	Premier lancement le 12 avril 1981, 135 vols au total.
Discovery	1996 -	Exploration du système solaire.	Ensemble de missions peu coûteuses. PathFinder (1996) : premier rover à rouler sur Mars.
ISS	1998 -	Station spatiale orbitale pour prendre la suite de la station Mir.	Station opérationnelle, fin de la construction en 2013.
Mars Exploration Rover	2003 - 2004	Envoi de robots mobiles pour étudier la géologie sur Mars.	Spirit (4 janvier 2004) et Opportunity (24 janvier 2004).
Mars Science Laboratory	2011 - 2012	Envoi d'un robot mobile pour étudier les composants minéraux et organiques sur Mars.	Curiosity (6 août 2012).

TABLE 1.2 - Principaux programmes spatiaux et missions spatiales des États-Unis. Source : [Capdevila,]

Date	Puissance	Nom du lanceur (origine)	Satellite
4 octobre 1957	URSS	R-7	Spoutnik
31 janvier 1958	USA	Juno I	Explorer 1
26 novembre 1965	France	Diamant	Astérix
11 février 1970	Japon	N-I (USA)	Oshumi
24 avril 1970	Rép. Pop. de Chine	CZ-1	Dong Fang Hong I
28 octobre 1971	Grande Bretagne	Black Arrow	Prospero
24 décembre 1979	Europe	Ariane 1	CAT
19 avril 1975	Inde	Cosmos-3M (URSS)	Aryabhata
19 septembre 1988	Israël	Shavit	Ofeq 1
2 février 2009	Iran	Safir 1	Omid
12 décembre 2012	Corée du Nord	Unha-3	Kwangmyongsong 3B
30 janvier 2013	Corée du Sud	KSLV1 (Russie)	STSAT 2C

TABLE 1.3 - *Chronologie des premiers satellites mis en orbite pour chaque pays*

1.2 Le marché du spatial

1.2.1 L'état du marché mondial

Le marché actuel des lanceurs est principalement partagé par quatre pays : La Russie, les États-Unis, la Chine et l'Europe (Tab. 1.4) et concerne en majorité des satellites destinés à des orbites basses et géostationnaires. Pour ce premier type d'orbites, la Russie et les États-Unis restent toujours leader en lançant plus de la moitié des satellites sur orbites basses, mais perdent des parts de marché en passant de 78% en 2010 à 55% en 2012, notamment par l'arrivée de la Chine et de l'Europe. Pour les orbites géostationnaires, l'Europe et la Russie conservent chacune 25% du marché. L'arrivée progressive de la Chine se fait sur tous types de satellites et prend même les devants en ce qui concerne les orbites héliosynchrones. Cette répartition est cependant fortement dépendante du caractère commercial ou non des satellites. L'exemple de 2012 (Tab. 1.5) montre que la répartition des satellites non-commerciaux (militaire, gouvernemental civil, à but non lucratif) est à peu près équilibrée avec 24% pour la Chine, 22% pour les États-Unis, 21% pour la Russie et 16% pour l'Europe. Par contre, les satellites commerciaux sont principalement envoyés par la Russie (30%) et l'Europe (25%). Ce chiffre ne reflète pas totalement la part de l'Europe, qui conserve une avance, en terme de bénéfices, sur les vols commerciaux (Tab. 1.6).

	2010				2011				2012			
	GEO	LEO	MEO	SSO	GEO	LEO	MEO	SSO	GEO	LEO	MEO	SSO
Europe	12	-	-	-	8	1	2	-	12	10	2	1
Russie	9	19	9	5	11	25	6	6	13	15	-	6
États-Unis	3	18	1	1	2	12	1	7	5	18	1	1
Chine	6	4	1	3	9	2	-	10	7	7	4	12
Total 4 pays	30	41	11	9	30	40	9	23	37	50	7	20
Total global	33	47	11	14	33	51	9	31	40	60	7	29

TABLE 1.4 - Nombre de satellites envoyés, par orbite et par pays, pour l'Europe, la Russie, les États-Unis et la Chine (GEO : orbite géostationnaire à 35794km, LEO : orbite basse de 160km à 2000km, MEO : orbite moyenne de 2000km à 34780km, SSO : orbite héliosynchrone de 600km à 1000km).
Sources : [Administration, 2011, Administration, 2012, Administration, 2013]

La Russie

La Russie possède une très grande expérience en terme de lanceur. Le lanceur Soyuz, toutes versions confondues, compte à l'heure actuelle plus de 1800 lancements réussis. Cependant, cette expérience ne suffit pas à assurer la fiabilité des lancements (Tab. 1.7). Les derniers déboires pour les lanceurs russes datent de 2012, avec un échec complet et un échec partiel pour le lanceur Proton,

Pays lanceur	Nombre de Lancements			Nombre de Charges Utiles			$Total_L/Total_{CU}$
	C	NC	$Total_L$	C	NC	$Total_{CU}$	
Russie	7	17	24	10	24	34	1,42
Chine	2	17	19	3	27	30	1,58
États-Unis	2	11	13	3	25	28	2,15
Europe	6	4	10	7	18	25	2,5
Iran	0	3	3	0	3	3	1
Multinational	3	0	3	3	0	3	1
Japon	0	2	2	0	2	2	1
Inde	0	2	2	0	2	2	1
Corée du Nord	0	2	2	0	2	2	1
Total	20	58	78	27	112	139	1,78

TABLE 1.5 - Nombre de lancements effectués et de satellites mis en orbite en 2012 (C : commercial, NC : non-commercial, Multinational : Sea Launch AG). Source : [Administration, 2013]

	2009	2010	2011	2012
Europe	\$1020	\$1320	\$808	\$1320
Russie	\$742	\$826	\$707	\$595
États-Unis	\$298	\$307	\$0	\$108
Multinational	\$280	\$0	\$200	\$300
Chine	\$70	\$0	\$140	\$90

TABLE 1.6 - Estimation des recettes issues des vols commerciaux (en million de dollars). Sources : [Administration, 2010, Administration, 2011, Administration, 2012, Administration, 2013]

auquel s'ajoute l'échec, le 1er février 2013, du lanceur russo-ukrainien Zenit. La Russie cherche à moderniser ses lanceurs en développant depuis quelques années la gamme Angara. Le député au Ministère de la Défense Russe, Yuri Borisov, a annoncé qu'une version légère de la gamme Angara devrait être testée courant 2014.⁶ Une version moins puissante du premier étage est d'ailleurs utilisée par le lanceur Coréen KSLV-1.

Les États-Unis

Les États-Unis conservent leur place en grande partie grâce à des satellites non-commerciaux qui ne peuvent être lancés par des lanceurs étrangers (loi ITAR⁷). Cependant, le pays, victime

6. http://en.itar-tass.com/russia/724680?utm_medium=rss20

7. http://pmddtc.state.gov/regulations_laws/itar_official.html

de difficultés budgétaires⁸, fait de nouveaux choix comme l'arrêt du programme de navettes spatiales ou l'appel à des lanceurs privés comme SpaceX [SpaceX,]. SpaceX propose pour l'instant le lanceur léger Falcon 9 et poursuit le développement du lanceur lourd Falcon Heavy. Les caractéristiques annoncées semblent très prometteuses : 53t en orbite basse et 12t en orbite de transfert. Les prix de lancement en orbite de transfert sont annoncés à \$83M pour une charge inférieure à 6,4t et \$128M pour une charge supérieure à 6,4t.⁹ Pour réduire ces coûts, SpaceX, qui utilise une technologie traditionnelle (mélange LOX/RP-1), mise sur le nombre de moteurs par lanceurs. Ainsi, l'étage inférieur du Falcon 9, (ou chaque étage inférieur du Falcon Heavy) possède neuf moteurs Merlin. En cas de panne de l'un des moteurs, les autres peuvent être utilisés un peu plus longtemps pour compenser la perte de poussée et ainsi limiter l'échec.¹⁰ De plus, le nombre conséquent de moteurs utilisés par lancement permet de garder la chaîne de construction active de façon plus régulière. La société continue de s'orienter vers des solutions pour réduire ses coûts en développant des étages réutilisables.¹¹

La Chine

La Chine s'installe progressivement sur le marché des lanceurs. Son programme spatial, calqué sur celui de la Russie 30 ans plus tôt, sert principalement de vitrine pour améliorer son image¹². Sa force cependant réside dans les coûts de production peu élevés et la fiabilité de ses lanceurs Longue Marche (Tab. 1.7). Comme les États-Unis ou la Russie, la Chine mise sur une large gamme de lanceurs afin de pouvoir répondre de manière appropriée à la demande. En dépit des problèmes de fonctionnement du rover lunaire Yutu, la Chine a confirmé sa présence sur la scène internationale.

1.2.2 La place de l'Europe

Depuis 2011, l'Europe augmente sa gamme de lanceurs. La collaboration avec la Russie par le biais de la société Starsem [STARSEM,] lui permet de bénéficier du lanceur moyen Soyuz 2. Parallèlement à cet accord, le lanceur léger italien Vega est mis progressivement en place afin de compléter l'offre européenne (1 vol en 2012, 1 vol en 2013). Tout comme le lanceur Proton, Ariane 5 a la capacité de lancer deux satellites en orbite de transfert en même temps, ce qui explique que la majorité des satellites commerciaux géostationnaires sont envoyés par les deux pays. Cette capacité

8. <http://www.atlantico.fr/decryptage/conquete-spatiale-est-elle-desormais-reservee-aux-geants-asiatiques-jacques-villain-499272.html>

9. http://www.spacex.com/falcon_heavy.php

10. Le 10 octobre 2012, l'un des moteurs Merlin s'est arrêté au bout de 79s. Bien que le module Dragon CRS-1 soit bien arrivé à la station ISS, cette panne remet en cause la fiabilité du lanceur [SpaceX,].

11. <http://www.spacex.com/news/2013/03/26/landing-leg>

12. <http://www.atlantico.fr/decryptage/conquete-spatiale-est-elle-desormais-reservee-aux-geants-asiatiques-jacques-villain-499272.html>

maintient pour l'instant le lanceur sur le marché mais certains points limitent son utilisation dans le futur :

- Le lancement double est le point fort du lanceur mais aussi une contrainte. Le lanceur ayant été initialement prévu pour le lancement de la navette Hermes¹³, il reste surdimensionné pour les lancements de satellites légers. De plus, l'arrivée de satellites de plus en plus lourds, comme le satellite TerreStar-1 de 6,9t (1er juillet 2009), oriente la demande vers les lancements simples¹⁴.
- Son coût n'est plus adapté (Tab. 1.7). Le besoin de subventions d'exploitation nécessaires pour le maintien d'Ariane 5 s'élève à 120 millions d'euros par an¹⁵.
- La capacité de réallumage n'est pour l'instant pas présente sur Ariane 5 ECA. Bien que le moteur Aestus ait cette capacité sur Ariane 5 ES (utilisation pour le réapprovisionnement de l'ISS avec la version ATV ou pour la mise en orbite des satellites Galileo), il n'est pas utilisable pour des mises en orbite multiples incluant les orbites de transferts géostationnaires. Il faut souligner que la quasi totalité des concurrents possède au moins un lanceur équipé d'un dernier étage propulsé par un moteur réallumable :
 - Russie : moteur RD-58M sur lanceur Proton avec Block DM, moteur S5.98M sur lanceur Proton avec block Breeze, moteur S5.92 sur lanceur Soyuz avec le Block Fregat.
 - Chine : moteur YF-75 du lanceur CZ-3A¹⁶, moteur YF-40A du lanceur CZ-4C¹⁷.
 - États-Unis : moteur Centaur sur le lanceur Atlas V, RL-10 sur Delta IV Heavy, Merlin sur Falcon9.
 - Japon : moteur LE-5 sur les lanceurs H-II.
 - Russie/Ukraine : moteur Block-D sur le lanceur Zenit en configuration 3SL et 3SLB.
- La modularité actuelle du lanceur est quasi nulle, ce qui impose l'utilisation de Vega mais surtout la dépendance au lanceur Russe Soyuz.
- Le schéma industriel¹⁸ reste complexe, avec 550 fournisseurs sur 12 pays. Par exemple, la société SpaceX mise sur une intégration verticale afin de mieux contrôler ses coûts.¹⁹

Pour résoudre ces problèmes, deux solutions ont été envisagées :

- Un moteur réallumable et plus puissant pour l'étage supérieur : le moteur Vinci (sec. 1.3).
- Un nouveau lanceur plus adapté au marché : Ariane 6.

13. <http://www.cnes.fr/web/CNES-fr/312-histoire-dariane-5.php>

14. [http://fr.wikipedia.org/wiki/Ariane_\(fus%C3%A9e\)](http://fr.wikipedia.org/wiki/Ariane_(fus%C3%A9e))

15. http://www.lepoint.fr/science/l-avenir-de-l-europe-spatiale-en-debat-a-naples-20-11-2012-1531139_25.php

16. <http://www.dragoninspace.com/rocketry/cz3a.aspx>

17. http://lanceurs.destination-orbite.net/cz_4.php

18. <http://www.challenges.fr/entreprise/20121121.CHA3296/industrie-spatiale-europeenne-ariane-5-face-a-un-vrai-probleme-de-competitivite.html>

19. <http://www.forbes.com/sites/beltway/2011/05/31/the-case-against-spacex-part-ii/>

L'évolution vers Ariane 6 a été officialisée le 21 novembre 2012²⁰ et devrait voir le jour aux alentours de 2020²¹. Ce nouveau lanceur est envisagé avec des moteurs à propulsion solide aux étages inférieurs et un moteur cryotechnique pour l'étage supérieur : le moteur Vinci²². Le renouvellement complet du lanceur étant très lourd, une version intermédiaire, Ariane 5ME (Midlife Evolution)²³, conservera les étages inférieurs d'Ariane 5 ECA et remplacera le moteur de l'étage supérieur par le moteur Vinci.

Le développement du moteur VINCI est donc la première étape du renouvellement du lanceur. Sa conception se situe dans la continuité des moteurs développés pour Ariane et son fonctionnement est comparable aux moteurs encore en exploitation.

20. <http://tempsreel.nouvelobs.com/economie/20121220.OBS3028/fin-d-annee-reussie-pour-ariane-5-ariane-6-en-projet-au-cnes.html>

21. <http://www.cnes.fr/web/CNES-fr/10692-gp-l-europe-s-elance-vers-ariane-6.php>

22. <http://www.usinenouvelle.com/article/selon-jean-yves-le-gall-l-europe-spatiale-doit-faire-ariane-6-ou-disparaitre.N197353>

23. <http://www.challenges.fr/economie/20121121.CHA3295/l-europe-spatiale-maintient-son-budget-de-10-milliards-d-euros.html>

Liste des sites de lancement	Exploitant	Lanceurs	Charge utile LEO	Charge utile GTO	Fiabilité en 2012 (nb total de vol)	Fiabilité sur 10 ans	Prix estimé
Kourou	Europe	ARIANE 5 ECA	17,2t	10,5t	6/6	38/39	\$220M
		ARIANE 5 ES-ATV	21t	8t	1/1	3/3	
		SOYOUZ 2*	7,8t	1,7t	2/2	4/4	
		VEGA	1,5t	-	1/1	1/1	
Baikonur Plesetsk	Russie	ROCKOT	2,3t	-	1/1	14/15	
		SOYUZ	6,7t	1,35t	9/9	92/95	
		SOYUZ 2	7,8t	1,7t	2/2	15/17	
		SOYUZ U	6,7t	-	1/1	4/4	
		PROTON K	20,9t	5t	1/1	18/18	
		PROTON M	22t	6,6t	9/10	60/67	\$100M
Odyssey Pacific Ocean Platform	Ukraine & Russie	Zenit 3SL (2)	15,2t	6,1t	3/3	17/18	\$100M
CCAFS VAFB Kwajalein Island KSC	USA	ATLAS V (401)	9,37t	4,75t	3/3	14/14	
		ATLAS V (531)	-	8t	1/1	2/2	
		ATLAS V (551)	18,51t	8,9t	1/1	3/3	
		DELTA IV (M+4,2)	12,24t	6,03t	1/1	9/9	
		DELTA IV (M+5,4)	13,36t	7,02t	1/1	1/1	
		DELTA IV (Heavy)	22,56t	12,98t	1/1	5/6	
		FALCON 9	10t	4,5t	2/2	4/4	\$54M
Jiuquan Taiyuan Xichang	Chine	CZ-2C	3,2t	1t	2/2	16/17	
		CZ-2D	3,5t	1,25t	3/3	15/15	
		CZ-2F	8,4t	-	1/1	8/8	
		CZ-3A	7,2t	2,5t	1/1	17/17	\$60M
		CZ-3B	13,6t	4,5t	5/5	17/17	\$70M
		CZ-3C	3,7t	-	3/3	10/10	
		CZ-4B	2,5t	1,5t	2/2	16/16	
		CZ-4C	4,6t	1,5t	2/2	8/8	
Satish Dhawan	Inde	PSLV CA	2,1t	-	1/1	1/1	
		PSLV XL	1,8t	1,1t	1/1	1/1	
Tanegashima	Japon	H IIA	11,73t	5,8t	1/1	19/20	
		H IIB	19t	8t	1/1	3/3	

TABLE 1.7 - Caractéristiques de la majorité des lanceurs utilisés en 2012, pour les orbites basses (LEO) et orbites de transfert géostationnaire (GTO) (CCAFS : Cape Canaveral Air Force Station, VAFB : Vandenberg Air Force Base, KSC : Kennedy Space Center), *coopération avec la Russie. Sources : [Bigot et al., 2009, Research and Center, , Krebs, , Alliance, , SpaceX, , Organisation, , Administration, 2013]

1.3 Une technologie centrale : le moteur fusée cryotechnique

Cette technologie utilise des réactifs stockés à basse température. Le couple H₂-O₂ étant le plus énergétique (évalué à partir de l'impulsion spécifique idéale²⁴ sur la Figure 1.6), il est souvent préféré aux couples kérosène-O₂ ou CH₄-O₂ qui sont cependant moins chers et demandent une technologie moins onéreuse. Le stockage à très basse température rend les réactifs liquides, ce qui apporte de la complexité au processus de combustion. Le lanceur Ariane 5 ECA utilise les moteurs cryotechniques Vulcain (Fig. 1.7 (a)) pour l'étage principal et HM-7B (Fig. 1.8 (a)) pour l'étage supérieur. Le moteur HM-7B sera, comme annoncé précédemment, prochainement remplacé par le moteur Vinci (Fig. 1.9 (a)). Les caractéristiques de ces trois moteurs figurent dans la Table 1.8.

1.3.1 Cycle d'approvisionnement en ergol de la chambre de combustion

Les moteurs Vulcain/HM-7B et Vinci utilisent deux cycles de fonctionnement différents :

- Le moteur Vulcain 2 (comme la famille des moteurs Merlin de SpaceX) utilise un cycle à flux dérivé (Fig. 1.7 (b)) : une partie de l'oxygène liquide et de l'hydrogène liquide sont déviées vers une chambre de combustion secondaire appelée générateur de gaz. Les gaz chauds créés par la combustion dans cette chambre secondaire vont entraîner les turbopompes pour l'hydrogène et pour l'oxygène qui alimenteront la chambre principale. Ils ne sont pas utilisés directement dans la chambre principale. Les ergols consommés par le générateur de gaz représentent 3% des ergols stockés. Le reste de l'oxygène liquide est directement envoyé dans la chambre principale, alors que le reste de l'hydrogène liquide suit un circuit le long de la tuyère et de la chambre de combustion, dans lequel il est réchauffé avant d'être injecté à l'état gazeux dans la chambre principale.
- Le moteur HM-7B utilise aussi un cycle à flux dérivé. La différence avec celui du moteur Vulcain réside dans l'utilisation d'une turbopompe commune pour l'oxygène et l'hydrogène (Fig. 1.8 (b)).
- Le moteur Vinci utilise un cycle expander (Fig. 1.9 (b)). Il n'y a pas de chambre secondaire. L'oxygène liquide est envoyé directement dans la chambre alors que l'hydrogène liquide passe intégralement dans un circuit préchauffage situé autour de la chambre de combustion pour être vaporisé. Le gaz ainsi détendu entraîne chacune des deux pompes pour l'oxygène et l'hydrogène, avant d'être envoyé dans la chambre. Le cycle expander du moteur Vinci consomme donc tous les réactifs embarqués dans la chambre principale, contrairement aux autres cycles. Cette particularité permet de fournir plus d'énergie à la poussée.

24. impulsion spécifique idéale (notée I_{sp}) correspond à la quantité de mouvement obtenue par unité de poids du carburant : $I_{sp} = F/(\dot{m}g_0)$ avec F la poussée fournie par le moteur, \dot{m} la masse de matière utilisée et g_0 l'accélération gravitationnelle

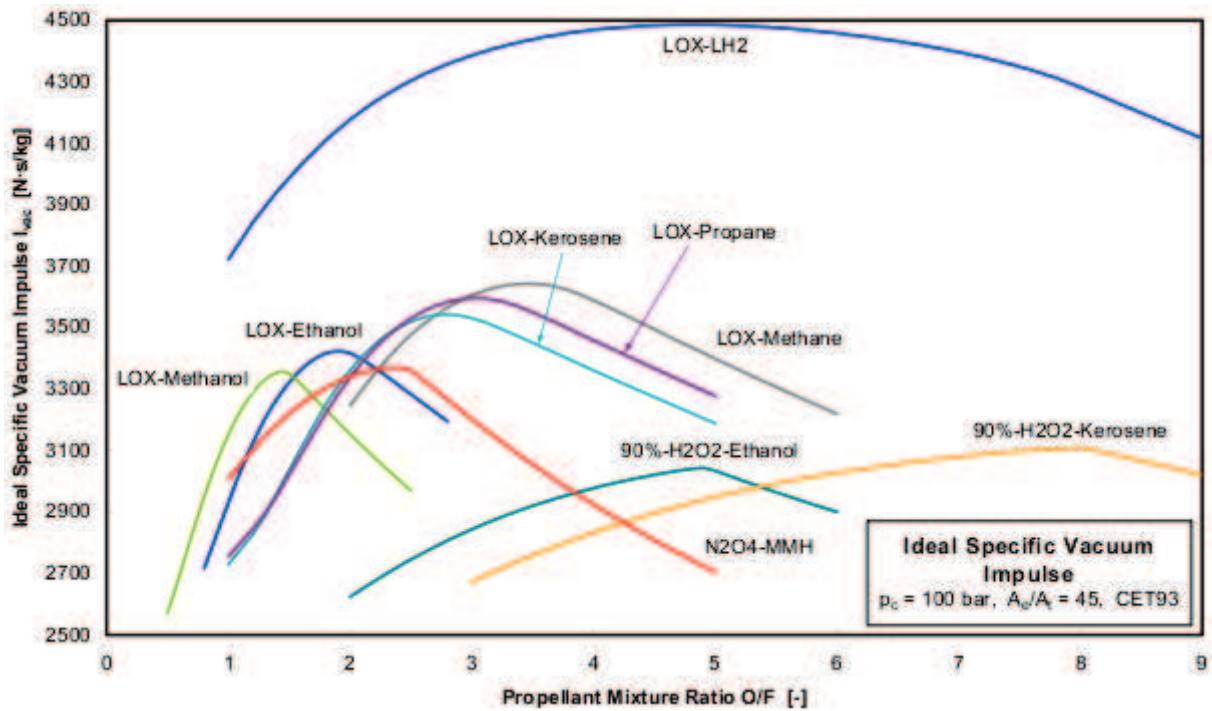
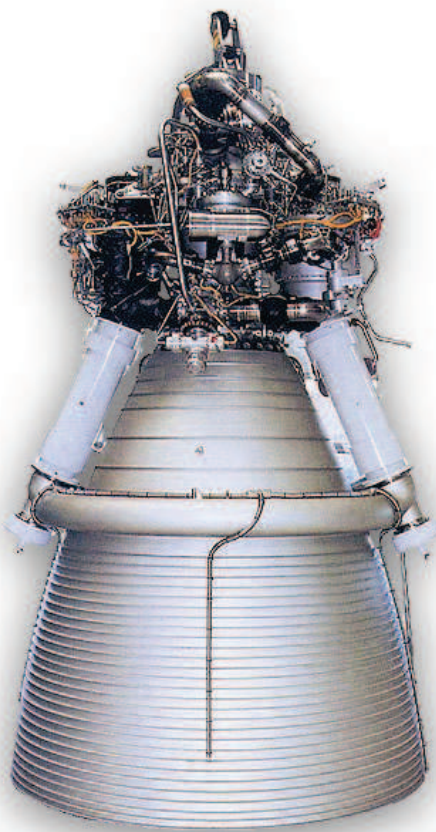


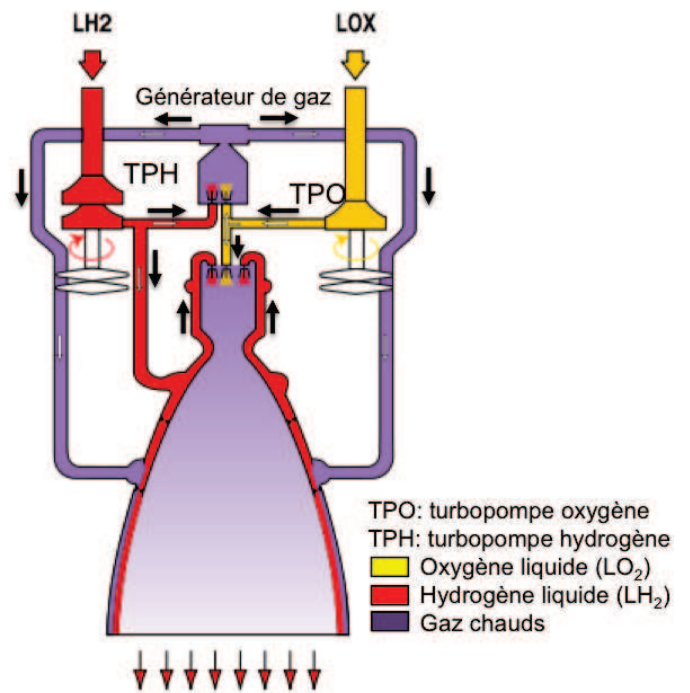
FIGURE 1.6 - Impulsion spécifique idéale en fonction du rapport de mélange pour 9 couples d'ergols.
Source : [Haidn, 2007]

Moteur	Vulcain 2	HM-7B	Vinci
Cycle de fonctionnement	flux dérivé	flux dérivé	expander
Poussée dans le vide (kN)	1340	64,80	180
Pression chambre [bar]	115	37	60
Rapport section chambre / section col	-	83,10	240
Ergols	LOx-LH ₂	LOx-LH ₂	LOx-LH ₂
Débits d'ergols [kg/s]	320	14,80	LOx : 33,7 LH ₂ : 5,80
Rapport de mélange	6,10	5,0	5,80
Vitesse de rotation turbine [tr/min]	LOx : 12300 LH ₂ : 35800	60800	LOx : 18000 LH ₂ : 90000
Puissance turbine [kW]	LOx : 5000 LH ₂ : 14000	400	LOx : 350 LH ₂ : 2800
Hauteur [m]	3,45	2,01	replié : 2,37/ déployé : 4,20
Diamètre sortie de tuyère [m]	2,10	0,99	2,20

TABLE 1.8 - *Caractéristiques des moteurs Vulcain2, HM-7B et Vinci. Sources : [ASTRIUM, , SNECMA,]*



(a)



(b)

FIGURE 1.7 - Photo (gauche) et schéma du cycle à flux dérivé (droite) du moteurs Vulcain 2.

Source : [SNECMA,]

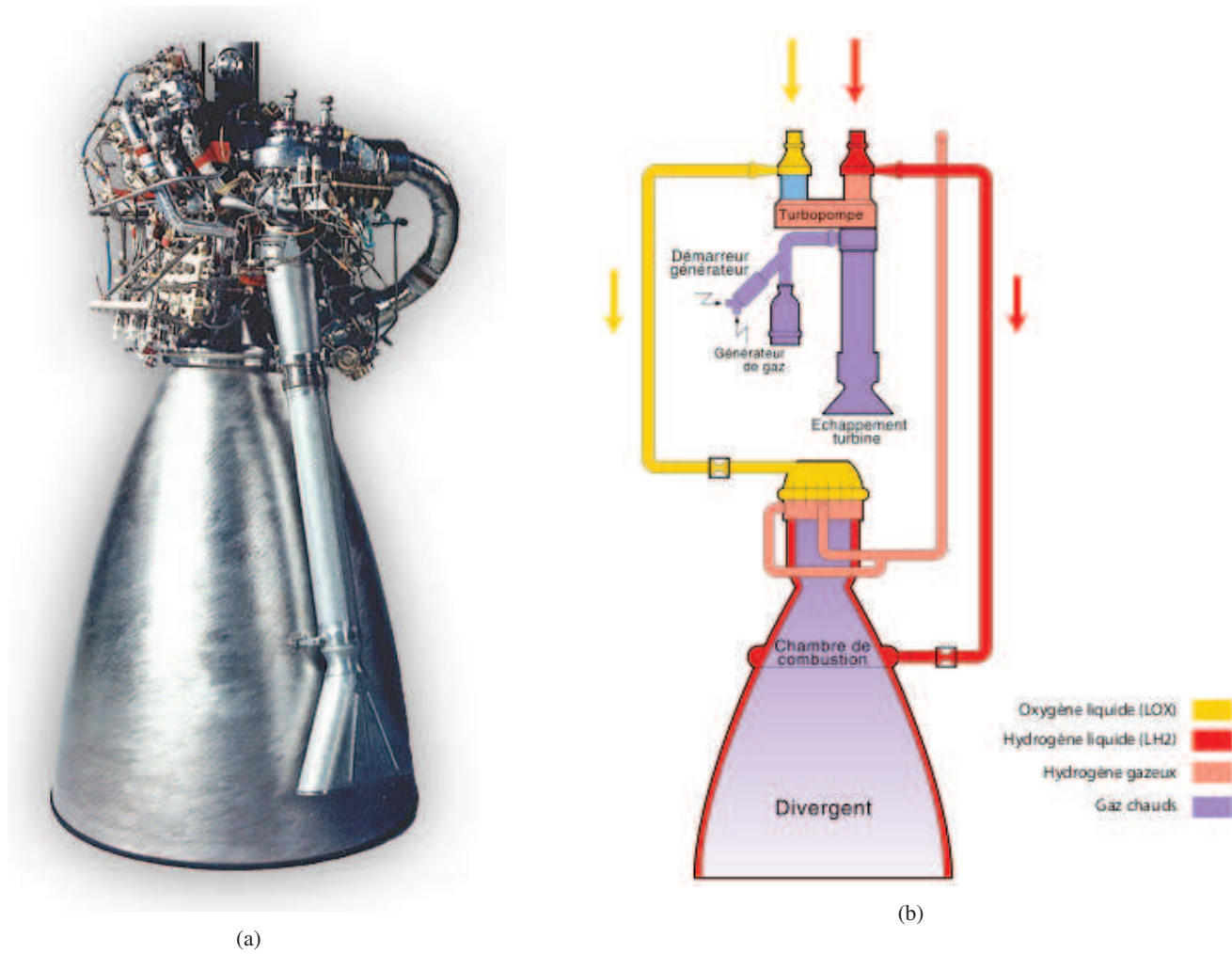
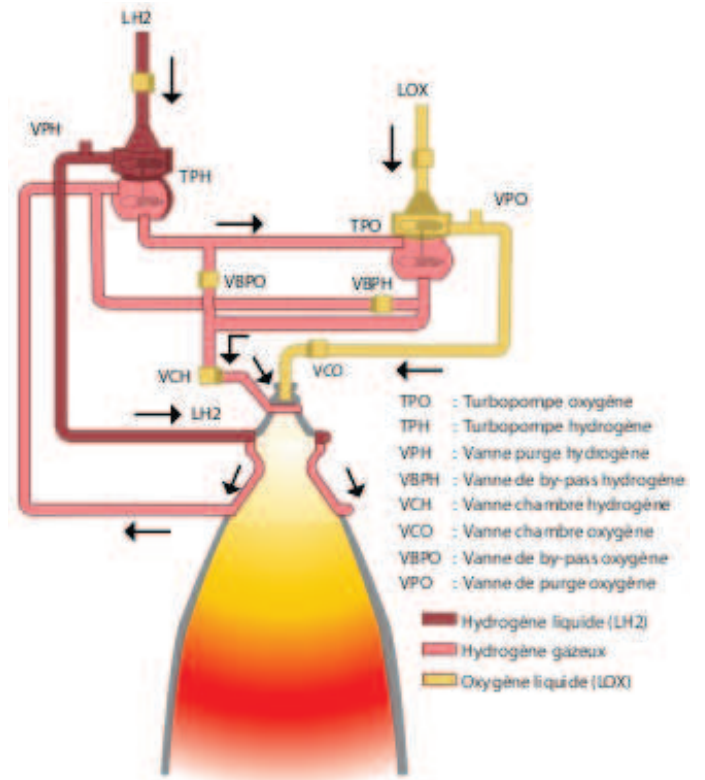


FIGURE 1.8 - Photo (gauche) et schéma du cycle à flux dérivé (droite) du moteurs HM-7B .
Source : [SNECMA,]



(a)



(b)

FIGURE 1.9 - Photo (gauche) et schéma du cycle expander (droite) du moteur Vinci. Source : [SNECMA,]

1.3.2 La chambre de combustion

Bien que les cycles d'approvisionnement en réactif des trois chambres soient différents, leur fonctionnement est similaire. Les Figures 1.10 (a) et 1.10 (b) représentent respectivement une photo et un schéma de coupe du moteur Vulcain. On distingue la chambre de combustion principale ouverte sur la tuyère, la plaque d'injecteurs en amont et une chambre de combustion secondaire appelée allumeur, qui a pour rôle de créer une torche de gaz chauds. La plaque d'injection (Fig. 1.11 (a)) permet de répartir dans la chambre l'hydrogène gazeux et l'oxygène liquide pour la combustion. Les gaz chauds issus de l'allumeur arrivent dans la chambre principale au centre de la plaque d'injection. L'utilisation d'un grand nombre d'injecteurs permet d'obtenir des flammes plus courtes et donc de réduire la longueur de la chambre. Les injecteurs sont de type coaxial pour injecter séparément les réactifs : l'oxygène liquide arrive au centre pour être atomisé par le jet d'hydrogène qui l'entoure. La plaque d'injection du moteur Vulcain 2 possède 566 injecteurs coaxiaux (Fig. 1.11 (a)), celle du moteur HM7 en possède 90 (Fig. 1.11 (a)), répartis sur 5 couronnes et celle du moteur Vinci en possède 122, répartis sur six couronnes.

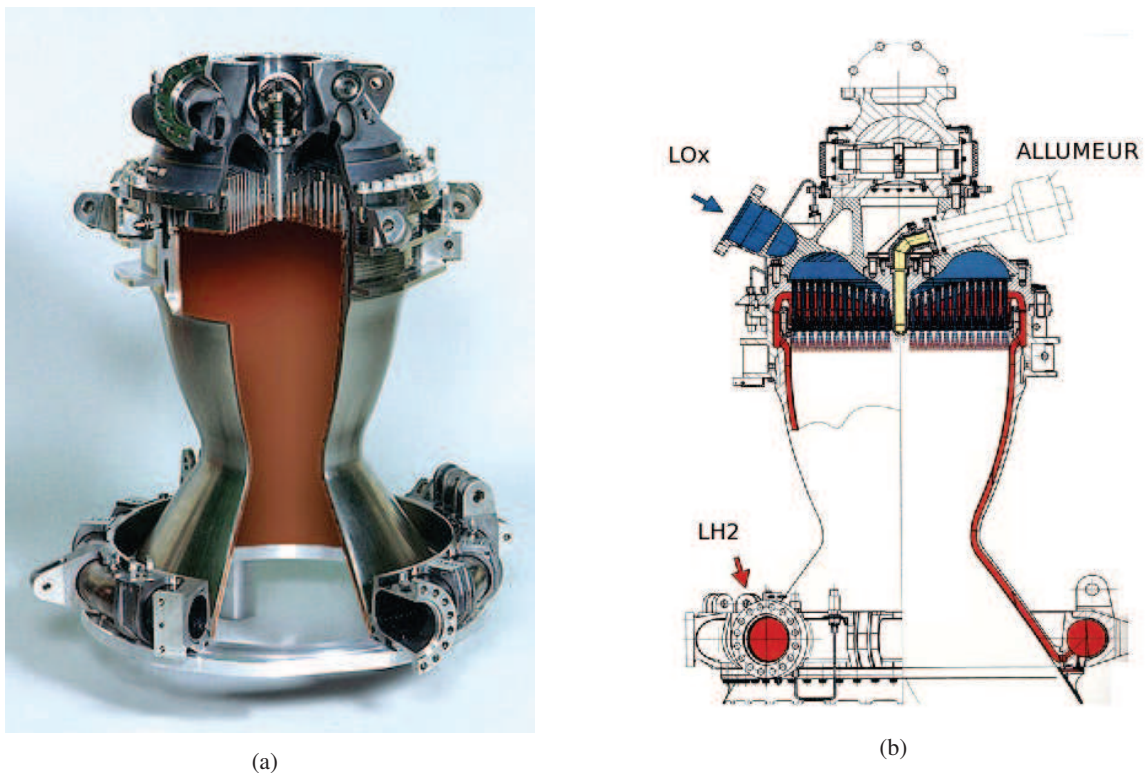
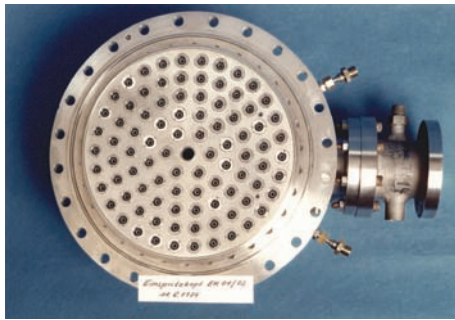


FIGURE 1.10 - Photo du moteur Vulcain (gauche) (Source : [Astrium,]) et schéma d'injection (droite).
Sources : [Haidn, 2007, Albat et al., 2007]



(a)



(b)

FIGURE 1.11 - Photo de plaque d'injection : moteur HM7 (gauche) et moteur Vulcain 2 (droite).
Source : [Astrium,]

1.3.3 La séquence d'allumage

Une séquence d'allumage d'un moteur cryotechnique se fait en plusieurs étapes. On en présente un exemple ici (Fig. 1.12) :

1. **Phase de mise en froid (Fig. 1.12 (a))** : Les ergols stockés à très basse température (20K pour l'hydrogène liquide, 90K pour l'oxygène liquide) induisent un très fort refroidissement des lignes d'injection alentour avant la mise en route du moteur. A ces températures, la vapeur d'eau contenue dans l'air se transforme en glace, ce qui peut boucher des conduits. Pour éviter ce phénomène, de l'hélium est injecté dans les lignes d'injection afin de les purger. En effet, contrairement à l'eau, l'hélium reste gazeux jusqu'à une température de 4,15K et liquide jusqu'à 0K, pour des pressions inférieures à 25 atm. La chambre est ainsi entièrement préremplie par de l'hélium froid.
2. **Phase de mise en route de l'allumeur (Fig. 1.12 (b))** : De l'oxygène et de l'hydrogène sont injectés dans la chambre de l'allumeur et allumés par une bougie. Les réactifs s'enflamment et sont chassés dans la chambre principale. La richesse globale du mélange étant pauvre, la torche est constituée d'un mélange de gaz brûlés et d'oxygène.
3. **Phase d'injection de l'hydrogène (Fig. 1.12 (c))** : L'injection d'hydrogène dans la chambre principale est mise en route. L'hydrogène froid provenant des injecteurs coaxiaux arrive dans un milieu où se trouvent les gaz chauds de l'allumeur.
4. **Phase d'injection de l'oxygène liquide (Fig. 1.12 (d))** : L'injection d'oxygène liquide est mise en route. La présence simultanée d'oxygène et d'hydrogène autour de la torche crée de nouvelles zones de réaction.
5. **Phase d'allumage (Fig. 1.12 (e))** : La chambre s'allume, les flammes se propagent et se stabilisent sur la plaque d'injection.

6. **Phase d'extinction de l'allumeur et montée en régime (Fig. 1.12 (f))** : Une fois les flammes stabilisées sur chaque injecteur coaxial, le travail de l'allumeur est terminé. Celui-ci cesse d'être alimenté, l'injecteur au centre de la plaque d'injection ne fournit plus de gaz brûlés.

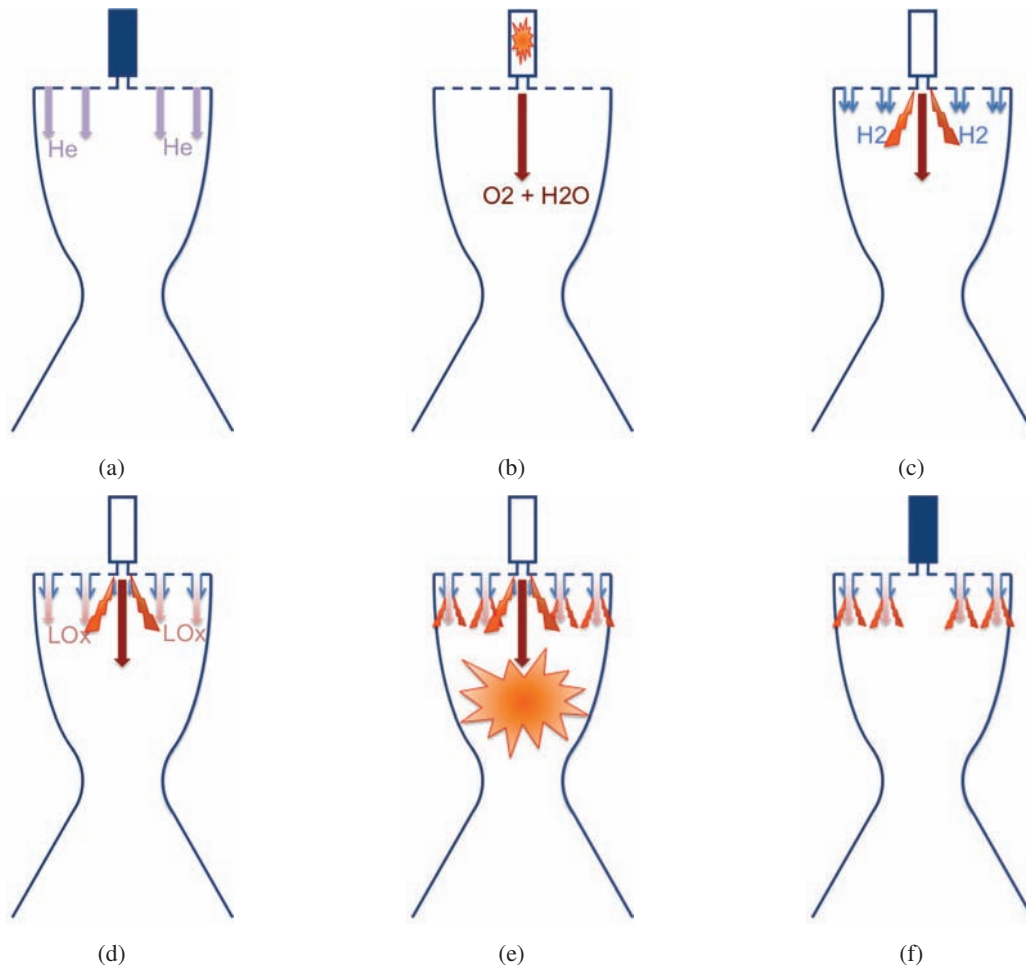


FIGURE 1.12 - Séquence d'allumage : phase de remplissage 1.12(a), Mise en route de l'allumeur 1.12(b), mise en route de l'injection d'hydrogène 1.12(c), mise en route de l'injection d'oxygène liquide 1.12(d), allumage 1.12(e) et montée en régime 1.12(f)

Les phases 1 à 4 et la phase 6 sont des phases contrôlées dans la mesure où elles concernent la séquence d'injection des ergols dans la chambre. Elles constituent la principale source de données lors de tirs d'essai. A l'inverse, la phase 5 reste une phase compliquée à caractériser. En dehors d'éventuelles sondes de pression, il n'est pas possible d'avoir des informations sur cette phase. Certains phénomènes tels que les allumages durs (allumage avec très forte augmentation de la

pression) doivent être évités. Une solution consiste à introduire progressivement le deuxième ergol. De cette manière, le rapport de masse de réactifs injectés n'est jamais égal à la stœchiométrie et permet à l'écoulement d'être allumé dès que le mélange dans la chambre est adéquate. C'est pour cela que la phase 4 n'est enclenchée qu'après que l'injection d'hydrogène soit suffisamment stabilisée.

1.4 Conclusion

Le nombre de succès consécutifs d'Ariane 5 démontre une certaine fiabilité sur le marché des lanceurs, en comparaison des lanceurs Russes ou Américains. Cette fiabilité est un élément important qui permet de valider a posteriori un certain degré de maîtrise dans la conception et l'utilisation des moteurs cryotechniques. Cependant, la connaissance exacte des phénomènes en jeu à l'intérieur du moteur reste délicate.

Les différentes technologies utilisées dans un moteur cryotechnique impliquent des conditions opérationnelles extrêmes qui sont, le plus souvent, inaccessible aux mesures en condition réelles d'utilisation. Que ce soit avant la chambre (remplissage des dômes d'injection, alimentation de la chambre...), ou dans la chambre (injection, combustion, régimes subcritiques/transcritiques/supercritiques, échanges thermiques ...), ces sujets restent des domaines de recherche actifs. Ces travaux étant focalisés sur l'injection, la combustion et l'allumage, le chapitre suivant permettra de dresser un état de l'art des études et de la compréhension des phénomènes que l'on peut rencontrer dans une chambre de combustion lors de l'allumage.

Phénomènes d'allumage et combustion dans une chambre de moteur fusée cryotechnique

Introduction

À la suite des deux échecs du moteur HM-7 en 1986, le CNES, la SNECMA, le CNRS et l'ONERA ont cherché à consolider leurs connaissances sur les phénomènes physiques entrant en jeu dans ces moteurs (injection, atomisation, allumage...). En 1993, ils forment le GDR (Groupe De Recherche) intitulé "Combustion dans les moteurs fusées". Cette initiative permet d'étudier l'aspect expérimental, théorique et numérique de problèmes tels que le mélange, l'atomisation, la combustion et les phénomènes à haute pression. Les résultats finaux ont été publiés en 2001 dans le GDR "Combustion dans les moteurs fusées" [CNES, 2001]. Ces initiatives ont permis entre autre de mettre en place des bancs d'essais dédiés aux conditions cryotechniques : les bancs Mascotte (ONERA), P8 et M3 (DLR) [Haidn and Habiballah, 2003]. La Figure 2.1 représente leur domaine d'utilisation respectif, en fonction de la pression et du débit LOx. La gamme de débits est représentative du débit d'un injecteur isolé dans une chambre réelle, mais les pressions de fonctionnement restent faibles (Tab.1.8 : $P_{VULCAIN2} = 115$, $P_{HM7B} = 37\text{bar}$ et $P_{VINCI} = 60\text{bar}$). Ces installations ont permis d'établir de nombreux résultats sur le fonctionnement interne d'une chambre de combustion cryotechnique, la Table 2.1 [Candel et al., 2006] présente quelques

études contenant des vues des diagnostics effectués. Ce chapitre résume les principaux résultats nécessaires à l'élaboration d'un calcul de chambre de moteur fusée.

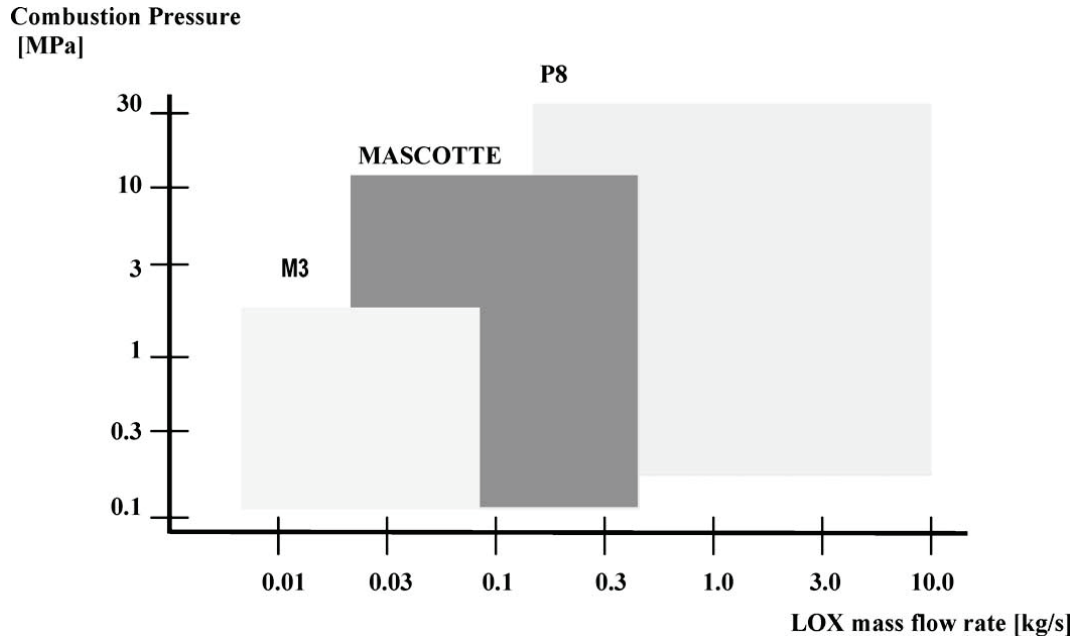


FIGURE 2.1 - *Domaine de fonctionnement en pression et débits des bancs du DLR et de l'ONERA.*
Source : [Haidn and Habiballah, 2003]

2.1 Structure du jet coaxial non-réactif

Dans de nombreux domaines de la combustion, les réactifs sont stockés à l'état liquide avant d'être injectés dans la chambre de combustion : diesel dans l'automobile, kérosène dans les moteurs d'avion, oxygène dans les moteurs cryotechniques de fusée. Il faut cependant préciser que le réactif doit s'évaporer avant d'être utilisé dans le processus de combustion proprement dit. La quantité de liquide évaporé dépendant de la surface de l'interface liquide-gaz, il est préférable d'atomiser le jet liquide (i.e. le transformer en un nuage de gouttes) afin d'augmenter cette surface. Le processus dépend de la manière dont on injecte le réactif liquide dans la chambre. On présente ici un état de l'art sur l'atomisation d'un jet liquide [Faeth, 1990, Bodele, 2004] puis d'un jet avec un co-courant gazeux [Hopfinger, 2001] proche des configurations que l'on retrouvera dans le cas des moteurs fusées cryotechniques.

Domaine d'étude	Références expérimentales	Bancs
Structure de flamme	Candel et al. [Candel et al., 1998] Cessou et al. [Cessou et al., 1998] Herding et al. [Herding et al., 1995, Herding et al., 1998] Juniper et al. [Juniper et al., 2000] Snyder et al. [Snyder et al., 1997]	Mascotte (ONERA)
	Mayer and Tamura [Mayer and Tamura, 1996]	(DLR)
Paramètres d'injection	Snyder et al. [Snyder et al., 1997]	Mascotte (ONERA)
	Mayer et al. [Mayer and Tamura, 1996]	(DLR)
Effets de la pression	Juniper et al. [Juniper et al., 2000, Juniper et al., 2001b] Singla et al. [Singla et al., 2005, Singla et al., 2006]	Mascotte (ONERA)
	Mayer et al. [Mayer et al., 1998]	(DLR)
	Smith et al. [Smith et al., 2007, Smith, 2007]	P8 (DLR)
Stabilisation de flamme	Herding et al. [Herding et al., 1996] Juniper et al. [Juniper et al., 2000]	Mascotte (ONERA)
	Mayer et al. [Mayer et al., 1998]	(DLR)
Effets du retrait	Juniper et al. [Juniper et al., 2001a] Kendrick et al. [Kendrick et al., 1998, Kendrick et al., 1999] Tripathi et al. [Tripathi et al., 1999]	Mascotte (ONERA)
Allumage	DeRosa et al. [De Rosa et al., 2006] Schmidt et al. [Schmidt et al., 2003, Schmidt et al., 2004] Gurliat et al. [Gurliat et al., 2003]	M3 (DLR)
	Mayer et al. [Mayer and Tamura, 1996, Mayer et al., 2001]	M3 & P8 (DLR)

TABLE 2.1 - Études expérimentales sur la combustion dans les moteurs fusées. Source : [Candel et al., 2006]

2.1.1 Généralités

Le processus d'atomisation d'un jet liquide résulte d'un phénomène complexe de déstabilisation de l'interface liquide-gaz. On distingue deux mécanismes élémentaires pour expliquer ce processus. Dans un premier temps, la force de cisaillement créée par la différence de vitesse entre les deux écoulements va perturber l'interface liquide-gaz et ainsi éplucher le jet pour créer des structures plus ou moins complexes (membranes, ligaments, paquets de gouttes...). On appelle ceci **l'atomisation primaire**. Dans un second temps, ces structures seront réduites au cours de **l'atomisation secondaire**. Pour caractériser les phénomènes d'atomisation, on définit les nombres adimensionnés suivants : le nombre de Weber We , le nombre d'Ohnsorge Oh et le nombre de Reynolds Re par les

relations :

$$We_d = \frac{\text{force aérodynamique}}{\text{force de tension superficielle}} = \frac{\rho_g D_l (U_g - U_l)^2}{\sigma} \quad (2.1)$$

$$Re = \frac{\text{force aérodynamique}}{\text{force de viscosité du gaz}} = \frac{\rho_g D_l |U_g - U_l|}{\mu_g} \quad (2.2)$$

$$Oh = \frac{\text{force de viscosité du liquide}}{\sqrt{\text{force aérodynamique} \times \text{force de tension superficielle}}} = \frac{\mu_l}{\sqrt{\rho_l D \sigma}} \quad (2.3)$$

où ρ_l, U_l, μ_l et ρ_g, U_g, μ_g sont la masse volumique, la vitesse et la viscosité respectivement du liquide et du gaz, D_l est le diamètre du jet liquide et σ est la tension de surface.

2.1.2 Différents régimes de brisure de jet

Dans le cas d'un jet liquide sans co-courant gazeux, Faeth [Faeth, 1990] décrit différents cas de brisure (break up) de jet liquide représentés par la Figure 2.2) :

Le régime de Rayleigh est caractérisé par l'interaction entre les forces d'inertie du liquide et les forces de tension superficielles. Les gouttes créées peuvent avoir un diamètre supérieur à celui du jet initial.

Le régime de "first wind-induced breakup" est dû à l'oscillation du jet liquide. Les gouttes créées ont un diamètre comparable au diamètre de l'injecteur.

Le régime de "second wind-induced breakup" est déstabilisé par les forces aérodynamiques. Le diamètre des goutte ainsi créées ont possèdent une plus grande variance par rapport au précédent régime.

Le régime d'atomisation est défini lorsque la force de cisaillement fragmente le jet à la sortie de l'injecteur. Dans ce cas, un brouillard dense de gouttes de petits diamètres est créé. Ce régime est visé dans le cadre des moteurs fusées cryotechniques.

Hopfinger et Lasheras [Hopfinger and Lasheras, 1996, Hopfinger, 1998, Hopfinger, 2001, Lasheras et al., 1998, Lasheras and Hopfinger, 2000] (entre autres) ont étudié le cas d'un jet co-axial liquide-gaz. La Figure 2.3 présente une cartographie des phénomènes rencontrés en fonction de définitions légèrement différentes du Reynolds liquide $Re_l = U_l D_L / \nu_l$ et du nombre de Weber $We = \rho_g U_g^2 D_l / \sigma$. Avec ces définitions, Re_l caractérise l'injection liquide et We caractérise l'injection gazeuse. A faibles We et Re_l , on retrouve le régime de Rayleigh. Lorsque le jet gazeux est très faible, il est nécessaire d'avoir $Re_l > 10^5$ pour obtenir une atomisation du jet (on retrouve le phénomène d'atomisation décrit précédemment dans le cas d'un jet liquide simple). Avec un co-courant gazeux, une couche de vorticit  se d veloppe du c t  du gaz qui d stabilise et atomise le jet en cr ant des ligaments.   nombre de Weber mod r  ($We \sim 100$), la taille des ligaments d pend de la tension de surface et ils sont souvent accompagn s par la formation de membranes. Lorsque l'on augmente la vitesse du gaz (grand We), les ligaments sont remplac s par des ligaments fibreux

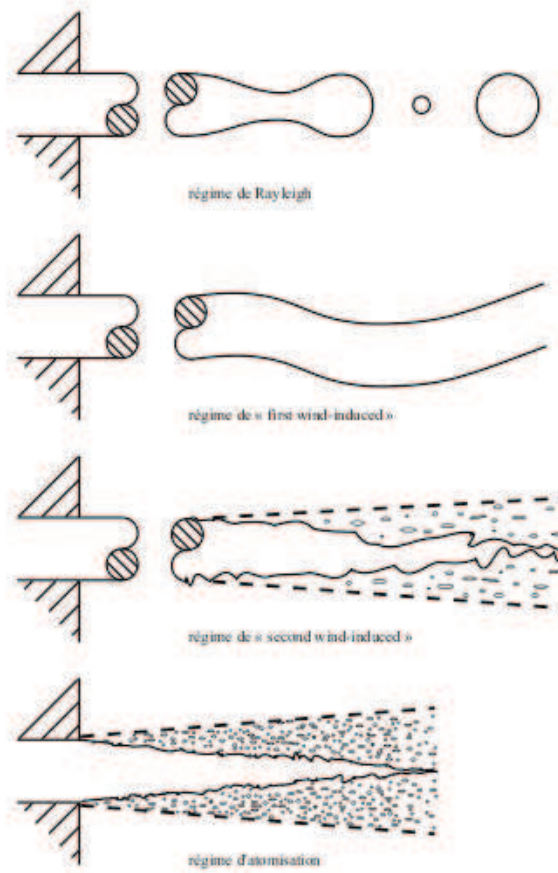


FIGURE 2.2 - Différent régimes de brisure de jet liquide sans co-courant gazeux. Sources : [Faeth, 1990, Bodele, 2004]

qui dépendent peu ou pas de la tension de surface. Une bonne atomisation requiert soit une grande vitesse liquide, soit une grande vitesse gazeuse, mais une grande vitesse gazeuse permet d'atomiser un jet liquide même de gros diamètre D_l , sur une courte distance, tant que le rapport des flux de quantités de mouvement J (Eq. (2.4)) est grand. Dans le cas de l'atomisation, on obtient un dard liquide comme représenté au bas de la Figure 2.2.

$$J = \frac{\rho_g U_g^2}{\rho_l U_l^2} \quad (2.4)$$

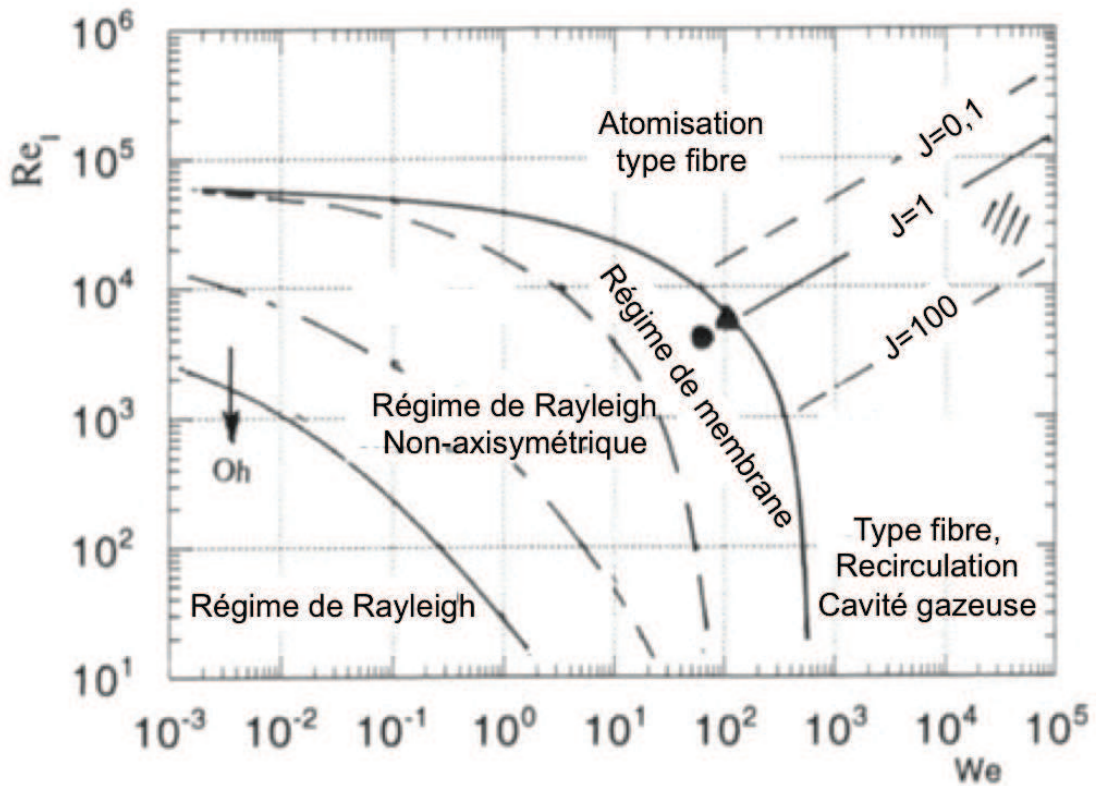


FIGURE 2.3 - Cartographie des différents régimes d'atomisation d'un jet liquide par un jet gazeux co-axial.
Source : [Hopfinger, 1998]

2.1.2.1 Longueur du dard liquide

On définit la longueur du dard liquide L comme la distance sur laquelle la fraction de présence du liquide reste maximale en moyenne. Elle est obtenue par la conservation des flux de masse liquide. Cette longueur dépend du diamètre du jet D_l et de J (Eq. (2.4)). Lorsque J est faible, cette longueur est déterminée par la turbulence du jet liquide (turbulence dans la couche de mélange). Lorsque J est grand, la turbulence du jet du gaz est responsable de l'épluchage du jet liquide. Les travaux de Przekwas [Przekwas, 1996] issus de la théorie d'ondes capillaires de Mayer [Mayer, 1961] donnent une dépendance de la forme [Hopfinger, 2001] :

$$\frac{L}{D_l} \propto J^{-2/3} U_l^{-1/3} \quad (2.5)$$

L'approche de Rehab [Rehab et al., 1997] et Lasheras [Lasheras et al., 1998] suppose que pour un nombre de Reynolds Re du gaz suffisamment grand, l'arrachement du liquide ne dépend ni de la tension de surface ni de la viscosité. Cette hypothèse mène à la relation simplifiée Eq. (2.6). Dans le cas où $U_l \ll U_g$, on obtient la relation Eq. (2.7) au premier ordre qui a le mérite d'être simple et robuste [Hopfinger, 2001].

$$\frac{L}{D_l} \approx \frac{6}{\sqrt{J}} \left| 1 - \frac{U_l}{U_g} \right|^{-1} \quad (2.6)$$

$$\frac{L}{D_l} \approx \frac{6}{\sqrt{J}} \quad (2.7)$$

Expérimentalement, la puissance de J n'est pas toujours de $1/2$. Marmottant et Villermaux [Marmottant and Villermaux, 2000] montrent que pour des We relativement faibles, le nombre de ligaments et la taille des gouttes dépendent de σ . On ne peut donc exclure totalement une faible dépendance à la tension de surface.

2.1.2.2 Angle du spray

L'inertie des gouttes éjectées autour du dard peut entraîner un angle du spray conséquent. Par rapport à l'axe du jet, le demi angle du spray diminue lorsque J augmente. Hopfinger en donne une expression approchée [Hopfinger, 2001] :

$$\theta \approx 45^\circ - \tan^{-1}(\sqrt{J}/12) \quad (2.8)$$

De nombreuses mesures (Stepowski [Stepowski et al., 1994], Carreau [Carreau et al., 1997] et Hong [Hong et al., 2000, Hong et al., 2001]) montrent qu'une très faible quantité de gouttes arrive à traverser le jet gazeux qui entoure le jet liquide.

2.1.3 Atomisation primaire

Le processus d'atomisation primaire est initié par une instabilité de Kelvin Helmholtz [Raynal, 1997] dans la couche limite à la base du jet à l'interface liquide-gaz. Cette instabilité est longitudinale, axisymétrique et de longueur d'onde $\lambda_l = B\delta_g(\rho_l/\rho_g)^{1/2}$ avec B une constante dépendant de l'injecteur ($B \approx 2$ pour les injecteurs axisymétriques [Marmottant and Villermaux, 2000]). Cette instabilité déstabilise le jet en créant des nappes, à leur tour déstabilisées pour former des ligaments et des gouttes (Fig.2.4(a)). Pour expliquer la création des ligaments, il existe deux scénarios, l'un défini par Marmottant et Villermaux [Marmottant and Villermaux, 2000] dépendant de la tension de surface, et l'autre de Lasheras et Hopfinger [Lasheras and Hopfinger, 2000] dépendant soit de la tension de surface soit de la viscosité, selon la valeur de We :

Marmottant et Villermaux [Marmottant and Villermaux, 2000] présentent la formation de

ces ligaments par une instabilité de Rayleigh-Taylor de longueur d'onde λ_{rt} (Eq. 2.9) avec des diamètres arithmétiques moyens de gouttes mesurés de $(d_{10})_{rt}$ (Eq. 2.10). Ce modèle n'a pu être vérifié que pour une faible gamme de vitesse gazeuse ($We < 500$).

$$\lambda_{rt} = 3,45\delta_g(\rho_l/\rho_g)^{1/3}We_{\delta_g}^{-1/3} \quad (2.9)$$

$$(d_{10})_{rt} \approx \lambda_{rt}/10 \quad (2.10)$$

Lasheras et Hopfinger [Lasheras and Hopfinger, 2000] proposent quant à eux deux scénarios en fonction de la valeur de We :

Lorsque celui-ci est relativement faible ($We \sim 100$), la nappe liquide est amplifiée par les instabilités de Kelvin Helmholtz et un bourrelet de rayon ξ se forme à son extrémité. Le diamètre des gouttes $(d_{10})_\sigma$ (Eq. 2.11) créées est alors proportionnel à ξ , avec un coefficient $C_1 \approx 6$ d'après les expériences [Marmottant and Villiermaux, 2000, Hong et al., 2001].

$$(d_{10})_\sigma = C_1 \frac{\sigma}{\rho_g U_g^2} \propto \xi \quad (2.11)$$

Lorsque We est d'un ordre de grandeur supérieur ou égal à 10^3 , l'étirement de la nappe de liquide par le gaz serait défini par la diffusion visqueuse du gaz. La couche de gaz se déstabilise perpendiculairement au jet liquide en imposant à ce dernier un taux d'étirement variable pour former des ligaments (ligaments fibreux). On obtient alors un diamètre de goutte $(d_{10})_\nu$ donné par la relation Eq. (2.12). En prenant l'expression Eq. (2.13) pour définir δ_g , on obtient une expression plus simple pour $(d_{10})_\nu$ (Eq. (2.14)).

$$(d_{10})_\nu = 5 \left(\frac{\nu_g}{U_g} 2\delta_g \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} \right)^{1/2} \quad (2.12)$$

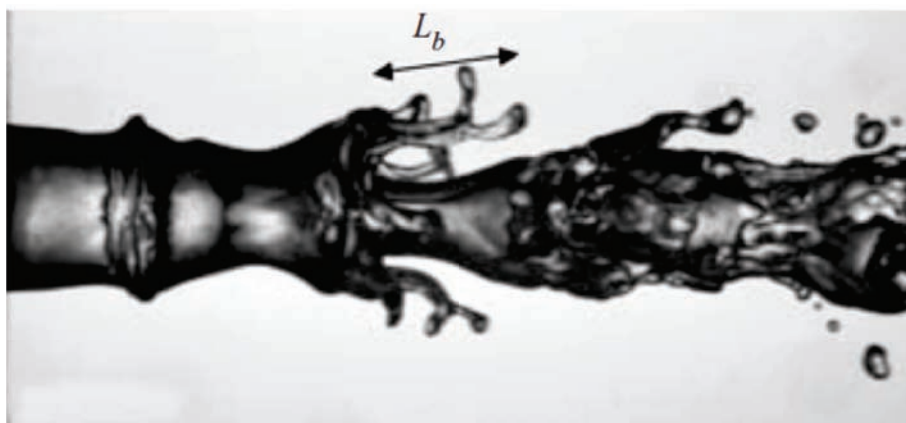
$$\delta_g \propto (U_g e / \nu_g)^{-1/2} \quad (2.13)$$

$$(d_{10})_\nu \propto U_g^{-3/4} \quad (2.14)$$

avec $e = (D_g - D_l)/2$, D_l le diamètre de l'injecteur liquide, D_g le diamètre extérieur de l'injecteur gazeux. Ce modèle semble bien en accord avec les observations de Marmottant [Marmottant, 2001]. On citera entre autres l'application des scénarios de Lasheras et Hopfinger [Lasheras and Hopfinger, 2000] dans les travaux numériques de Kim et Moin [Kim and Moin, 2011] qui ont donné de bons résultats (Fig. 2.4).

2.1.4 Atomisation secondaire

L'atomisation secondaire intervient dès lors qu'une poche de liquide s'est détachée du dard liquide. Il existe dans la littérature principalement trois causes décrivant les phénomènes entrant en jeu.



(a)



(b)

FIGURE 2.4 - Vue instantanée de l'atomisation primaire d'un jet liquide dans le cas expérimental (a) (Marmottant et Villermaux [Marmottant and Villermaux, 2004]) et numérique (b) (Kim et Moin [Kim and Moin, 2011]).

L'atomisation par cisaillement dépend du nombre de Weber [Pilch and Erdman, 1987] et a lieu pour $We_d = \rho_g(\Delta_U)^2 d / \sigma > 20$ environ [Hopfinger, 2001], avec d la taille des gouttes après l'atomisation primaire et $\Delta_U = U_g - U_{goutte}$. La taille minimale des gouttes issues de ce mécanisme est de [Hopfinger, 2001] :

$$d_s \approx 20 \frac{\sigma}{\rho_g U_g} \quad (2.15)$$

Dans un moteur fusée, la zone où $\Delta_U \approx U_g$ reste proche du cône potentiel, ie. à une distance de l'ordre de la longueur du dard liquide [Hopfinger, 2001]. A une distance environ de $3D_l$ de l'injecteur, la vitesse relative Δ_U est environ divisée par 10, ce mécanisme n'est alors plus efficace [Hopfinger, 2001].

L'atomisation par la turbulence du gaz, dit de Kolmogorov, a été pour la première fois énoncée par Lasheras [Lasheras et al., 1998]. C'est la forte variation de vitesse qui est à l'origine de ce phénomène. Ce mécanisme n'est cependant pas très important dans les injecteurs de type moteurs fusées [Hopfinger, 2001].

L'atomisation par collisions entre gouttes a été proposée par Georjon et Reitz [Georjon and Reitz, 1999] et Vallet [Vallet et al., 2001]. Ce mécanisme semble être présent dans les conditions moteurs fusées mais reste faible devant l'atomisation par cisaillement [Hopfinger, 2001].

Cas supercritique

Cette section n'a abordé que la problématique de la structure du jet dans la cas subcritique, ie. les conditions de pression et de température permettent au fluide dense d'être à l'état liquide. Dans certaines conditions de pression et de température, il est possible d'obtenir un fluide supercritique pour le jet central. Un fluide supercritique est un fluide très dense avec une tension de surface nulle, que l'on pourrait assimiler à un gaz dense [Oefelein and Yang, 1998, Oefelein, 2002, Schmitt, 2009, Schmitt et al., 2010, Ruiz and Selle, 2011, Schmitt et al., 2011, Ruiz, 2012]. Bellan [Bellan, 2000] présente une revue des différents cas subcritiques et supercritiques très détaillée. Des différentes études expérimentales, on constate que dans le cas supercritique, on ne peut alors plus parler d'évaporation mais seulement de variation forte et continue de la masse volumique. Dans ce cas, il n'y a plus d'ondes à la surface du liquide qui destabilisent le jet, mais plutôt une formation de filaments qui se dissolvent dans le fluide environnant.

2.2 Structure de flamme

Les résultats expérimentaux présentés ci-dessous sont obtenus par plusieurs méthodes de diagnostics optiques complexes. L'une des plus utilisées pour observer la présence et la structure de la flamme est la fluorescence induite par laser plan (PLIF). Cette méthode consiste à utiliser un laser

dont la fréquence permet d'exciter un radical (souvent OH). Le faisceau du laser passe par une lentille pour être aplani, puis est dirigé vers la flamme. Les radicaux excités émettent un rayonnement capté par une caméra rapide. Comme les autres diagnostics optiques, cette technique demande un accès visuel à la chambre, ce qui restreint son utilisation à des configurations de recherche.

2.2.1 Pression subcritique

En dessous de sa pression critique (50,5 bar), l'oxygène à basse température est à l'état liquide. D'après de nombreux travaux [Snyder et al., 1997, Rehab et al., 1997, Villermaux, 1998, Lasheras et al., 1998], les caractéristiques des jets inertes restent valides dans le cas réactif. La revue de Candel et al. [Candel et al., 1998] résume différents résultats (Herding et al. [Herding et al., 1996, Herding, 1997], Mayer et al. [Mayer and Tamura, 1996, Mayer et al., 1998], Snyder et al. [Snyder et al., 1997]) sur la structure de ces flammes cryotechniques :

- La flamme se stabilise au voisinage du tube LOx (Fig. 2.5). L'épaisseur réactive est fine et très ondulée.
- La flamme forme un tube autour du jet LOx, depuis le bord du tube, et s'élargit en direction de l'aval de l'écoulement, autour de l'oxygène sous forme de gouttes ou gazeux. On parle d'épanouissement de la flamme.
- Le taux de combustion est fortement influencé par l'évaporation, et donc l'atomisation du jet liquide.
- La densité en nombre de gouttes reste toujours faible car celles-ci sont vite évaporées par la flamme.
- La flamme semble toujours être accrochée au tube interne de l'injecteur. Ceci confirme la présence d'un régime de flamme de diffusion.

Dans ces conditions, les modèles d'atomisation décrits dans le cas froid restent valables. Les plus petites poches d'oxygène (des gouttes aux ligaments) disparaissent progressivement avec l'augmentation de la pression [Juniper, 2001]. Lorsque l'on augmente la pression, on atteint progressivement le régime transcritique. Pour ce régime intermédiaire, l'atomisation sous forme de goutte n'existe quasiment plus [Juniper et al., 2000].

2.2.2 Pression supercritique

À haute pression, l'oxygène devient supercritique. Juniper et al. [Juniper et al., 2000] et Mayer et Tamura [Mayer and Tamura, 1996] montrent qu'il y a disparition du phénomène d'atomisation en ligaments et gouttes. La Figure 2.6 résume la différence de structure des flammes entre les cas subcritique et supercritique. Les résultats de Juniper et al. [Juniper et al., 2000] montrent que l'épanouissement de la flamme est moindre dans le cas supercritique (Fig. 2.7), et confirment les

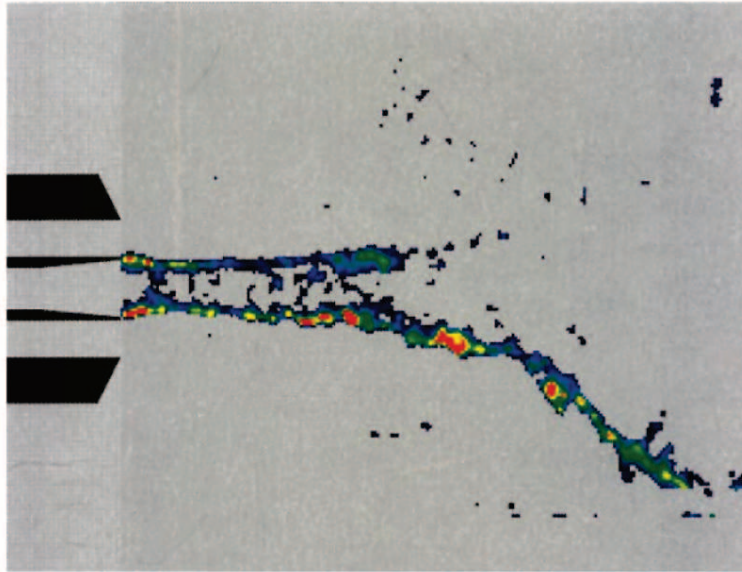


FIGURE 2.5 - Fluorescence induite (LIF) du radical OH, à 5 bar. Source : [Herding et al., 1996]

résultats de Herding [Herding, 1997], à savoir que cette dilatation est de moins en moins dépendante de J à haute pression. À haute pression, le taux de combustion devient dépendant du taux de mélange turbulent. A basse pression, la flamme est donc fortement influencée par l'atomisation et la vaporisation du jet, alors qu'à haute pression, elle est dépendante de la vitesse de l'hydrogène [Juniper et al., 2000]. Ces résultats de stabilisation de flamme ont été confirmés numériquement par notamment par Oefelein [Oefelein, 2002], Schmitt [Schmitt, 2009, Schmitt et al., 2010, Schmitt et al., 2011] et Ruiz [Ruiz and Selle, 2011, Ruiz, 2012]

2.2.3 Effet du retrait du tube central

La Figure 2.8 présente la structure de la flamme dans le cas où l'on impose un léger retrait du tube interne de l'injecteur coaxial par rapport au tube extérieur [Kendrick et al., 1998, Kendrick et al., 1999, Tripathi et al., 1999, Juniper et al., 2001a]. Les effets d'un tel retrait sont connus depuis longtemps et sont un classique des technologies d'injection en moteur fusée. Les résultats de Kendrick et al. [Kendrick et al., 1998, Kendrick et al., 1999] montrent qu'un retrait du tube LOx augmente le taux d'épanouissement de la flamme. Son analyse est la suivante : la flamme existant dans la zone de cisaillement à l'intérieur du tube extérieur, les gaz brûlés occupent un certain volume. L'hydrogène est alors accéléré, ce qui augmente le rapport des quantités de mouvement J ,

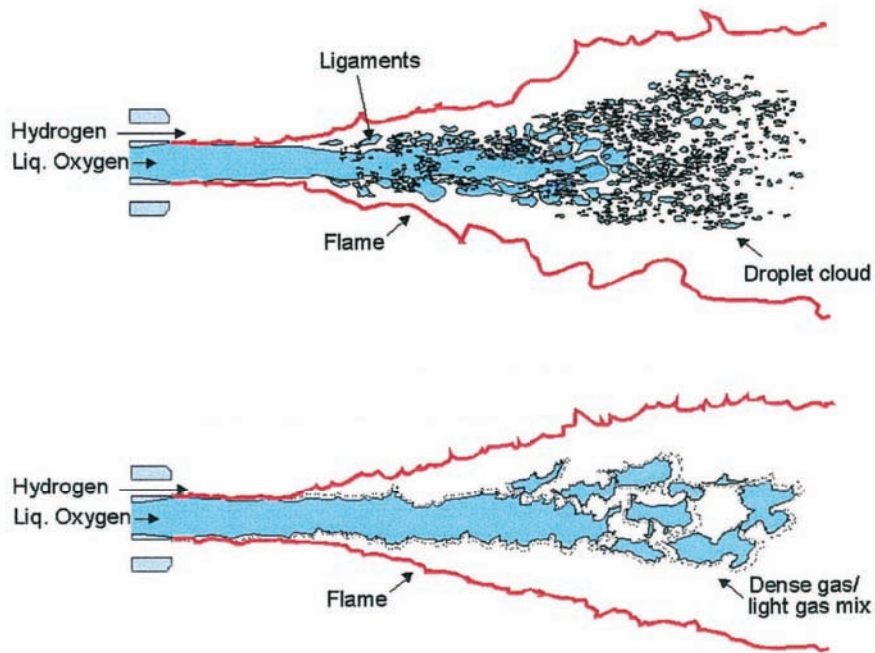


FIGURE 2.6 - Structure d'une flamme cryogénique H_2/LOx issue d'un injecteur coaxial. Haut : Pression inférieure à la pression critique de l'oxygène, Bas : Pression supérieure à la pression critique de l'oxygène.

Source : [Juniper, 2001]

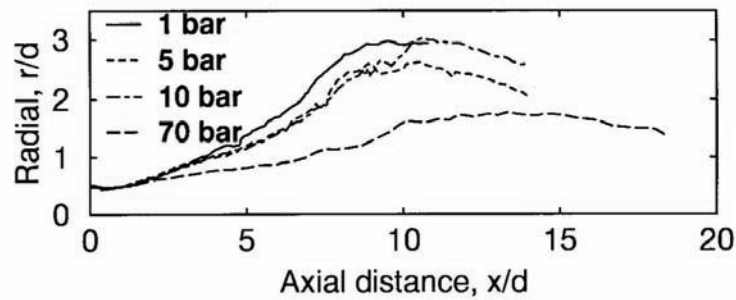


FIGURE 2.7 - Position du maximum d'intensité de la transformée d'Abel pour des flammes cryogéniques à différentes pressions, et rapports de moments J équivalents ($J = 14,5$ à $1 - 5 - 10\text{bar}$; $J = 11$ à 70bar). A 70bar , le diamètre du tube d'hydrogène est de $2 \times d_{LOX}$ au lieu de $2,4 \times d_{LOX}$ aux pressions inférieures.

Source : [Juniper et al., 2000]

et donc aussi l'atomisation primaire et secondaire. Ce processus aboutit à l'augmentation de l'angle d'expansion de la flamme [Kendrick et al., 1999]. Cette explication est cohérente avec les résultats expérimentaux obtenus avec des jets inertes. Cette première analyse sera complétée par les travaux de Juniper [Juniper, 2001], sur les instabilités créées et amplifiées par ce retrait.

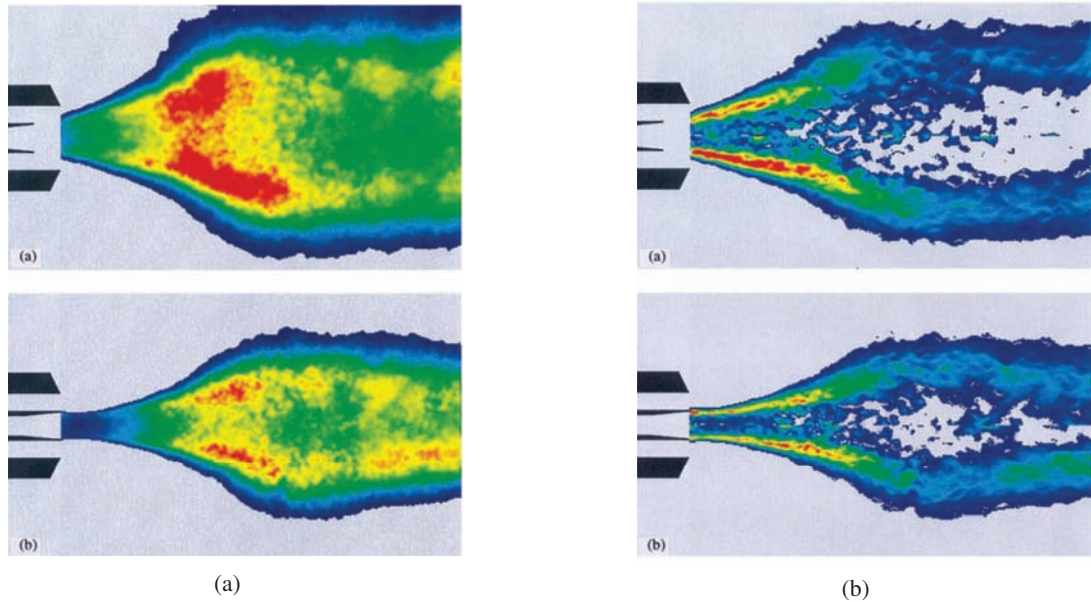


FIGURE 2.8 - Images de l'émission de lumière moyenne (gauche) et instantanée obtenues par tomographie numérique après une transformée d'Abel. Injecteur avec retrait (haut), injecteur sans retrait (bas).
Source : [Kendrick et al., 1999]

2.3 Stabilisation de flamme

Indépendamment des techniques de retrait du tube interne, des études ont été menées pour connaître les mécanismes expliquant la stabilisation de la flamme (Fig. 2.9). Les premiers résultats expérimentaux en configuration oxygène gazeux et hydrogène gazeux sont dus à Deshpande [Deshpande et al., 1997]. Les études sur le cas de l'oxygène liquide sont rares. Les mesures de Singla en méthane [Singla et al., 2005] et en hydrogène [Singla et al., 2006] (Fig. 2.10) apportent des confirmations pour certains des nombreux travaux théoriques et numériques d'Oefelein et Yang [Oefelein and Yang, 1998] et Juniper et al. [Juniper, 2001, Juniper and Candel, 2003c, Juniper and Candel, 2003a, Juniper and Candel, 2003b]. Les deux principaux mécanismes évoqués pour la stabilisation d'une flamme à l'injecteur sont liés à l'épaisseur de flamme et au nombre de Damköhler. Lorsque la flamme est plus mince que l'épaisseur de la paroi du tube interne, elle est peu sensible au nombre de Damköhler. Celle-ci reste dans le sillage de la paroi (Fig. 2.9). Lorsqu'elle est plus large, la flamme est alors exposée à l'écoulement et elle devient très sensible au nombre de Damköhler [Juniper and Candel, 2003a, Juniper and Candel, 2003b] (Fig. 2.10). Oefelein [Oefelein, 2005] ajoute que la prise en compte des échanges thermiques à la paroi de l'injecteur peuvent aussi expliquer un décollement de la flamme.

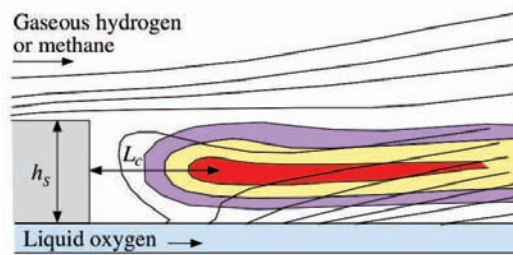


FIGURE 2.9 - Représentation schématique de la stabilisation de la flamme dans le sillage de la lèvre de l'injecteur LOx. Source [Singla et al., 2007]

2.4 Allumage en configuration académique

L'allumage constitue la phase cruciale pour un moteur. Son importance est telle que l'on choisit d'allumer le premier étage d'Ariane 5 au sol, alors que sa poussée n'est pas efficace à cette altitude, pour s'assurer de sa bonne mise en route. Cet excès de précaution reflète le manque de connaissances et d'expériences dans le domaine de l'allumage. Les données expérimentales sur le transitoire de l'allumage dans un moteur fusée sont rares [McManus et al., 1993, Quintilla et al.,

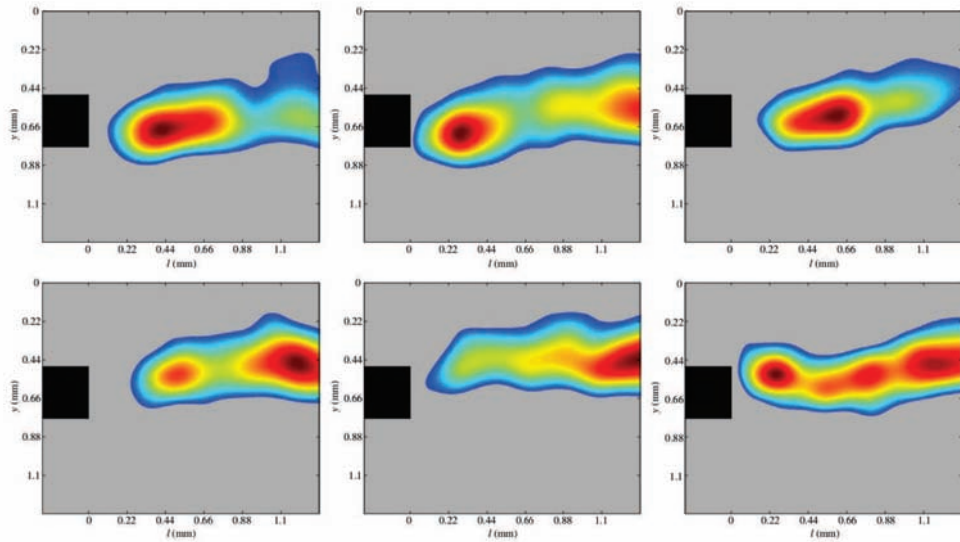


FIGURE 2.10 - Images obtenues par OH-PLIF de la région d'accrochage de la flamme. L'oxygène liquide et l'hydrogène gazeux sont injectés respectivement au-dessus et au-dessous du séparateur. $P = 6,3 \text{ MPa}$.
Source [Singla et al., 2007]

2001, Bjorklund, 1983, Ballal and Lefebvre, 1978, Arai et al., 1993]. Ce n'est qu'à partir de 2001 que l'on trouve des études expérimentales qui cherchent à définir et expliquer l'allumage d'un injecteur LOX/ GH_2 . Mayer et al. [Mayer et al., 2001] observent que la densité du spray de gouttes est élevée avant l'allumage et quasiment inexistante une fois la flamme établie. Les diagnostics optiques de Mayer et al. [Mayer et al., 2001] n'étant pas adaptés, la visualisation de la flamme n'est remarquable que par ce changement de configuration du spray au passage de la flamme.

La suite des études présentées ici a été effectuée sur le banc M3 du DLR.

2.4.1 Quatre phases

Le phénomène d'allumage est observé par Schmidt et al. [Schmidt et al., 2001] et trois phases sont identifiées dans la séquence : une phase primaire d'allumage, une phase explosive (expansion brutale du volume de gaz chauds), et une phase de stabilisation. Cette classification est complétée par Gurliat et al. [Gurliat et al., 2003] qui utilise pour la première fois un système à prise d'images rapide pour observer l'évolution de la flamme et identifie quatre phases. La Figure 2.12 présente ces quatre étapes typiques [Gurliat et al., 2003] retrouvées par calcul LES [Lacaze et al., 2009] :

Phase I - L'allumage initial : le noyau de flamme se développe et est emporté par l'écoulement en aval. Il y a une compétition entre d'une part, la vitesse de convection et la qualité du mé-

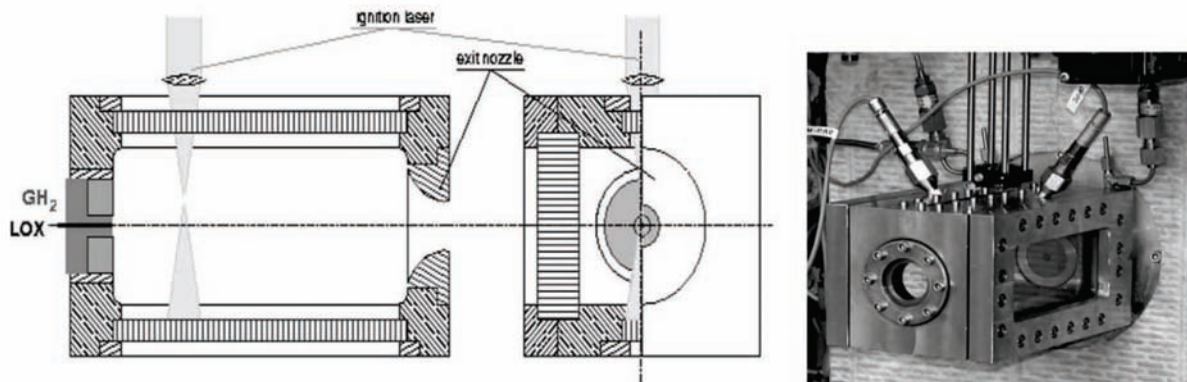


FIGURE 2.11 - Schéma de coupe (gauche) et photo (droite) de la chambre de combustion M3 avec allumage laser. Source : [Gurliat et al., 2003]

lange diphasique et d'autre part, la chaleur libérée et échangée dans la couche de cisaillement (Fig. 2.12 a).

Phase II - La propagation de flamme : elle vient consumer le prémélange localisé dans les zones de recirculation autour du jet principal. Pour un allumage lent, cette phase dure 2ms, et pour un allumage rapide, 0,1ms [Gurliat et al., 2003]. Cette phase se caractérise par une augmentation de la luminosité et par un pic de pression. L'intensité lumineuse dans le cas rapide est largement plus grande (Fig. 2.12 b).

Phase III - : Le décollement ou l'éloignement (Lift off) de la flamme : le prémélange étant entièrement consommé dans les zones de recirculation, le front de flamme s'éloigne progressivement de l'injecteur. Ce mouvement est principalement convectif et s'arrête lorsque les vitesses de propagation et de convection se compensent. Bien que la zone de recirculation contribue à l'évaporation de l'oxygène liquide, on retrouve ici une phase similaire à l'allumage initial, principalement contrôlé par la couche de mélange (Fig. 2.12 c).

Phase IV - La stabilisation (anchoring) de la flamme : cette phase de stabilisation débute lors de la deuxième remontée de la flamme vers l'injecteur, dans la couche de cisaillement du jet. La vitesse de remontée dépend de la vitesse du jet. La flamme se stabilise soit à une certaine distance de l'injecteur, lorsqu'un équilibre se crée entre la vitesse de propagation du front de flamme et la vitesse de l'écoulement, soit en s'accrochant à l'injecteur (Fig. 2.12 d). La position de stabilisation de la flamme dépend du point de fonctionnement étudié.

De plus, ces travaux ont mis en avant les éléments suivants importants à prendre en compte :

- Le caractère rapide ou lent de l'allumage peut être associé à la vitesse de combustion des zones prémélangées de recirculation.
- D'après les conditions expérimentales, les allumages rapides sont caractérisés par de grands

We , et les allumages lents par de petits We .

La vitesse de l'allumage des zones de recirculation dépend donc de la capacité du jet H_2 à atomiser le jet LOx pour créer une zone prémélangée la plus favorable. Les travaux de De Rosa et

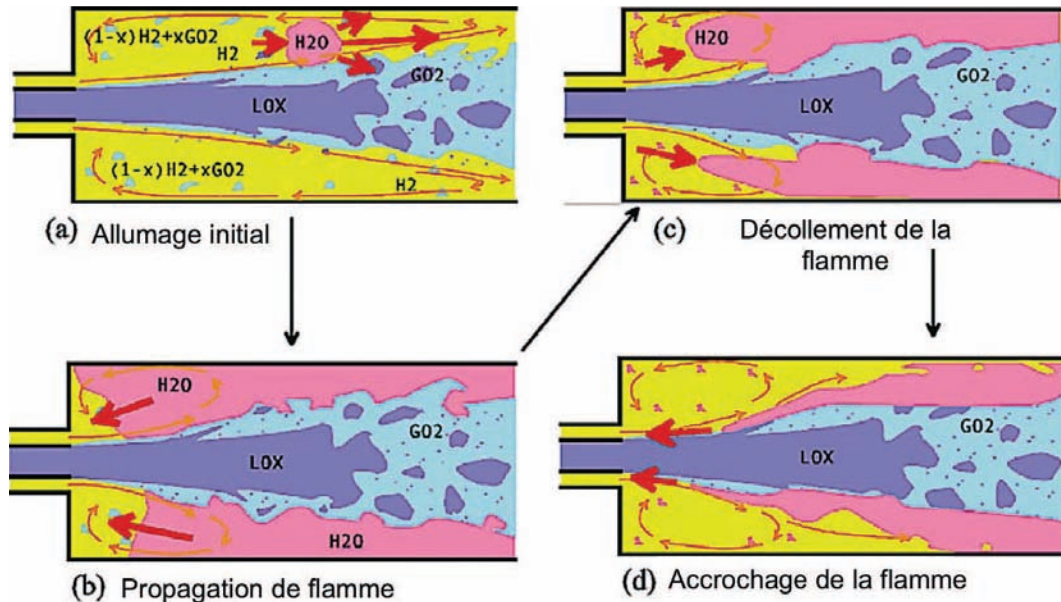


FIGURE 2.12 - Séquence d'allumage d'une configuration mono-injecteur en conditions moteur fusée [Gurliat et al., 2003].

al. [De Rosa et al., 2006] apportent de nouvelles informations à propos de l'allumage :

- Les quatre phases de Gurliat et al. [Gurliat et al., 2003] sont confirmées.
- L'angle du spray est proportionnel au rapport de pression entre le dôme d'injection LOx et la chambre.
- Le phénomène d'évaporation éclair ("Flashing") du LOx à basse pression accélère l'évaporation.
- Les vitesses de propagation du front de flamme ne semblent pas différentes de celles mesurées dans Gurliat et al. [Gurliat et al., 2003]

2.4.2 Trois scénarios

Les travaux de Schmidt et al. [Schmidt et al., 2004] apportent une nouvelle dimension au phénomène d'allumage, en distinguant trois scénarios qui lient les précédentes recherches. Ces trois scénarios dépendent des conditions d'injection et sont définis en fonction des quatre phases décrites

plus haut. Dans les trois cas, l'allumage commence par la convection en aval du noyau de flamme (Phase I), puis plusieurs évolutions sont possibles :

Le soufflage (blow out) de la flamme : Le noyau se développe mais est convecté en aval de la chambre. L'émission d' OH est faible.

Le scénario en trois phases : après la Phase I, le front de flamme devient suffisamment rapide pour remonter l'écoulement (Phase II). Une fois l'écoulement remonté jusqu'à la plaque d'injection, la flamme s'accroche à l'injecteur et se stabilise (Phase IV). Ce scénario correspond aux résultats de Schmidt et al. [Schmidt et al., 2001].

Le scénario en quatre phases : après les Phases I et II citées dans le scénario en trois phases, la flamme se décolle de la plaque d'injection (Phase III) puis vient se stabiliser à une certaine distance de l'injecteur (Phase IV). Ce scénario correspond aux résultats de Gurliat et al. [Gurliat et al., 2003]

Les conclusions de ces travaux insistent sur l'importance du moment de l'écoulement d'hydrogène $I_{H_2} = \rho v_{H_2}^2 A$. Il semble qu'en-dessous d'une certaine valeur du moment de l'écoulement ($I_{H_2} < 0,8$), le noyau soit soufflé. La limite entre les scénarios à trois et quatre phases est plus floue, mais il ressort que le scénario à quatre phases apparaît pour les valeurs les plus élevées de I_{H_2} . Contrairement à la caractérisation des flammes établies, la condition d'allumage semble dépendre de I_{H_2} et non pas de We ou de J . Cependant, il est possible de relier We à la valeur maximale du pic de pression.

2.5 Calculs de configurations industrielles

Les études de combustion sur des jets uniques ont été complétées ces dernières années par des études multi-injecteurs afin de se rapprocher des conditions géométriques des moteurs fusées. Ces études ne sont que numériques et les résultats sont rares car souvent confidentiels. On présente ici trois études présentant des calculs de chambre de type moteur cryotechnique.

2.5.1 Études 2D

Quelques études en régime établi existent dans la littérature. On peut citer les travaux de Masquelet et al. [Masquelet et al., 2008] (Fig. 2.13) et de Prelick [Prelick et al., 1998] avec des calculs 2D simplifiés. Larsson [Larsson, 2012] a rédigé un rapport sur une étude d'écoulement réactif stationnaire en 2D dans une configuration représentative de moteur :

Masquelet et al. [Masquelet et al., 2008] : Ils effectuent une étude comparative à partir de calculs LES 2D axisymétriques, l'un en gaz parfait, l'autre en gaz réel. Le domaine étudié représente un jet de gaz chauds avec deux injecteurs coaxiaux H_2/O_2 de part et d'autre. L'effet gaz réel du calcul n'est visible que dans le noyau d'oxygène issu des injecteurs. L'étude retrouve l'importance de la

brisure du jet d'oxygène par l'hydrogène. Les jets semblent avoir une faible longueur de pénétration dans la chambre, que l'on peut supposer imputable au caractère 2D des calculs.

Larsson [Larsson, 2012] : Les travaux de Larsson visent à prédire le dégagement de chaleur de la combustion sur la paroi pour estimer le besoin en refroidissement de la paroi. Les calculs sont effectués avec le logiciel Rocflam-II d'Astrium [Frey et al., 2010]. Ces calculs présentent trois configurations : la première est une partie tronquée de la chambre du moteur VINCI avec seulement deux couronnes, la deuxième reproduit la chambre de combustion CALO (Calorimetric) [Hagemann et al., 2002, Hagemann et al., 2003], la troisième reproduit la chambre du moteur Vulcain 2. La chambre CALO permet des mesures de ce dégagement de chaleur, et peut donc être comparée aux calculs. Les résultats sont mitigés dans une zone de 10 cm à partir de la plaque d'injection. Au delà, le dégagement de chaleur est très bien retrouvé.

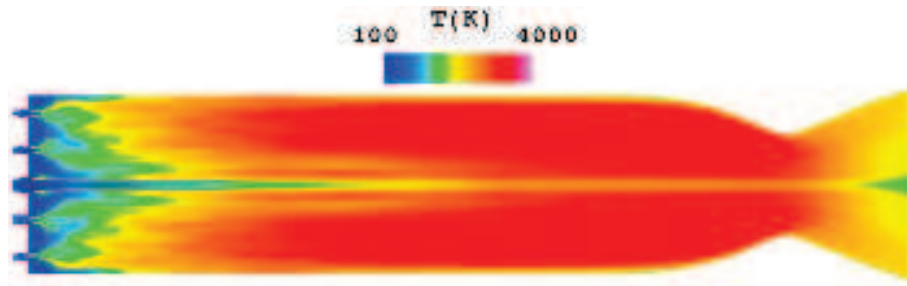


FIGURE 2.13 - Cas Masquelet : champ de température moyenne. Source : [Masquelet et al., 2008]

2.5.2 Études 3D

Seulement deux travaux en 3D ont pu être trouvés dans la littérature concernant des calculs de moteurs cryotechniques.

La première étude est issue de la thèse d'Izard [Izard, 2009, Izard and Mura, 2009] avec un calcul 3D d'un secteur de chambre contenant l'allumeur et un injecteur coaxial (Fig. 2.14). La partie de l'étude accessible concerne l'allumeur central, en particulier son auto-allumage et sa dépendance au rapport de pression entre la condition d'entrée et la pression dans la chambre. Ce calcul RANS utilise le modèle MIL (Modèle Intermittent Lagrangien) de Borghi et Gonzales [Obounou et al., 1994] pour modéliser la combustion turbulente non-prémélangée.

La deuxième étude est celle de Lacaze [Lacaze, 2009], qui semble être l'étude la plus évoluée en terme de calcul moteur. Son calcul 3D LES en gaz parfait présente une géométrie de chambre cylindrique munie d'un allumeur central et de six injecteurs placés sur un cercle dont l'allumeur en est le centre. Seulement deux injecteurs, de part et d'autre de l'allumeur, sont en marche. Le calcul propose une séquence d'allumage avec un développement de la flamme et sa remontée jusqu'aux injecteurs. La Fig. 2.15 en montre deux instantanés. Dans ce calcul, le modèle de com-

bustion turbulente utilisé pour toutes les zones de réaction, y compris les zones de combustion non-prémélangées, est le modèle TFLES (cf. sec 5.3).

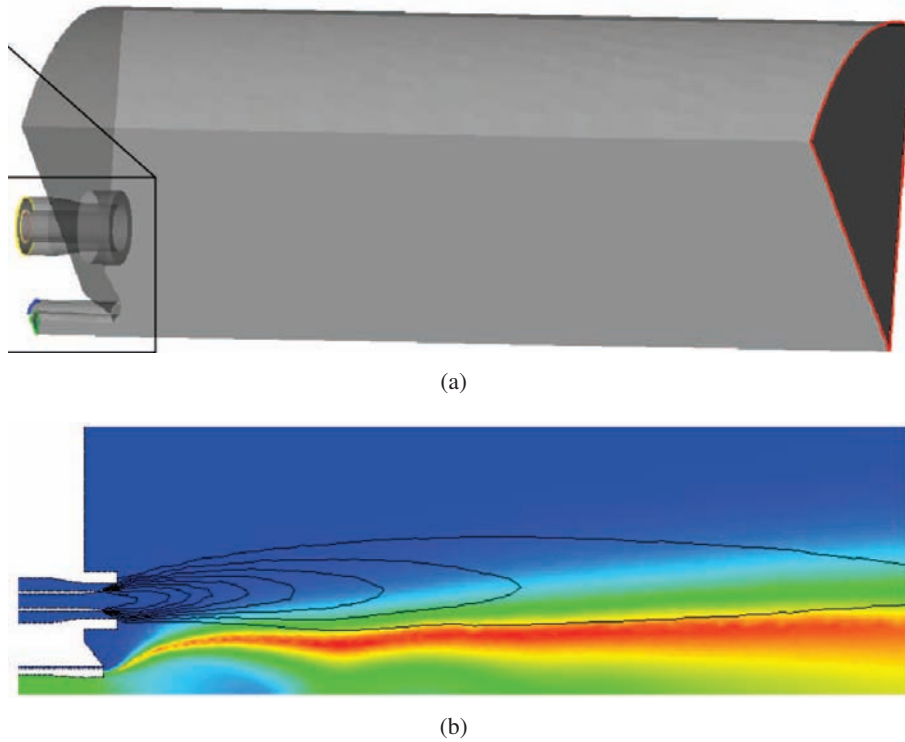


FIGURE 2.14 - Cas Izard : configuration d'étude 3D (a) et champ de température moyenne et isovaleurs de la fraction massique en oxygène issu de l'injecteur coaxial (b). Sources [Masquelet et al., 2008, Izard, 2009]

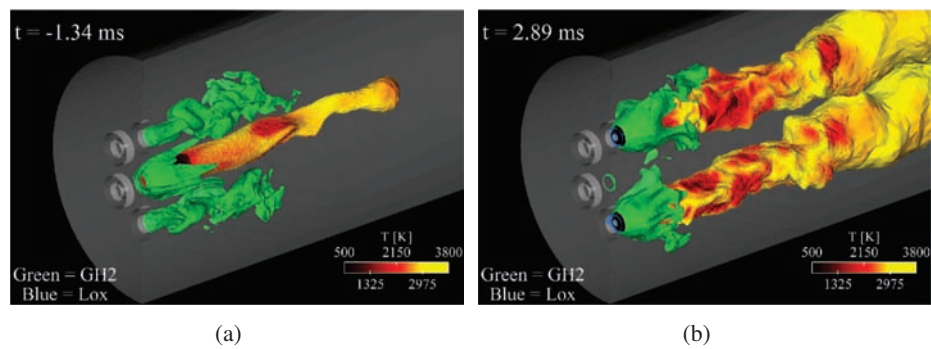


FIGURE 2.15 - Cas *Lacaze* : vues instantanées du calcul d'allumage avant la propagation de la flamme (a) et après la propagation de la flamme (b) aux injecteurs coaxiaux. Source [Lacaze, 2009]

Objectifs et structure de la thèse

Dans la continuité des travaux de Lacaze [Lacaze, 2009], l'objectif final des travaux présentés ici est la mise en place et le calcul d'une séquence réduite d'allumage sur une configuration simplifiée 3D d'un moteur fusée cryotechnique. Les différentes études menées sur les moteurs cryotechniques ont permis d'identifier les points suivants comme des points critiques à contrôler lors de la mise en place du calcul de chambre :

- La présence du jet sous-détendu de la torche et l'injection supersonique
- Le jet d'oxygène liquide et l'injection de la phase dispersée
- L'utilisation des réactifs H_2/O_2 et d'une cinétique adaptée
- La nature des flammes et les modèles pouvant représenter au mieux la combustion turbulente
- Le mode de propagation de la flamme
- La position de la flamme dans la chambre et un maillage raisonnable du domaine de calcul

En plus de la partie Introduction, ce manuscrit a donc été organisé en deux grandes parties, dédiées chacune à un aspect particulier du calcul de chambre 3D (Fig. 2.16) :

La modélisation de la combustion turbulente est un point clé pour aborder les questions mentionnées ci-dessus. Les études précédentes ont le plus souvent utilisé des modèles pour la combustion turbulente prémélangée. Il y a donc un effort à faire pour mieux décrire la combustion non-prémélangée que l'on rencontre dans les chambres de moteurs fusées. Après avoir présenté les équations et les codes utilisés (Chap. 3), on présentera une étude de la cinétique chimique, notamment sur l'apport des récents travaux de Boivin [Boivin et al., 2011, Boivin, 2011, Boivin et al., 2012] pour les flammes $H_2 - O_2$ (Chap. 4). Ensuite, un travail sur le modèle de combustion sera effectué afin de déterminer le meilleur moyen de traiter les différents régimes de combustion, et de proposer un modèle général pour les flammes prémélangées et non-prémélangées (Chap. 5). Cette partie sera clôturée par une étude sur le moyen de distinguer ces deux régimes de combustion pour pouvoir leur appliquer un traitement spécifique (Chap. 6).

L'allumage d'une chambre de type moteur cryotechnique présentera finalement la simulation et

l'allumage d'une chambre simplifiée de moteur fusée. Ce calcul intégrera des résultats des parties précédentes en termes de modèle et de différentes études menées en 2D pour la géométrie et de la séquence temporelle. L'apport du 3D sera évalué par comparaison aux calculs 2D faits précédemment. Après avoir analysé de manière globale le calcul d'une séquence simplifiée (Chap. 7), deux études plus approfondies seront menées pour investiguer d'une part, les différents régimes de combustion (Chap. 8) et d'autre part, les différents modes de propagation de la flamme propres à cette configuration (Chap. 9).

Pour aller plus loin dans la compréhension de ces résultats, le lecteur trouvera en annexe :

Un résumé des équations nécessaires pour définir les conditions d'injections gazeuses (Annexe A, p. 215).

Une étude préliminaire de la problématique de l'allumage en 2D (Annexe B, p. 219).

Une étude de l'influence du confinement en 2D (Annexe C, p. 221).

Une étude sur la séquence d'allumage en 2D (Annexe D, p. 223).

Les caractéristiques géométriques de la chambre étudiée (Annexe E, p. 225).

Un calcul de chambre similaire à celui étudié au Chap. 7 (Annexe F, p. 227).

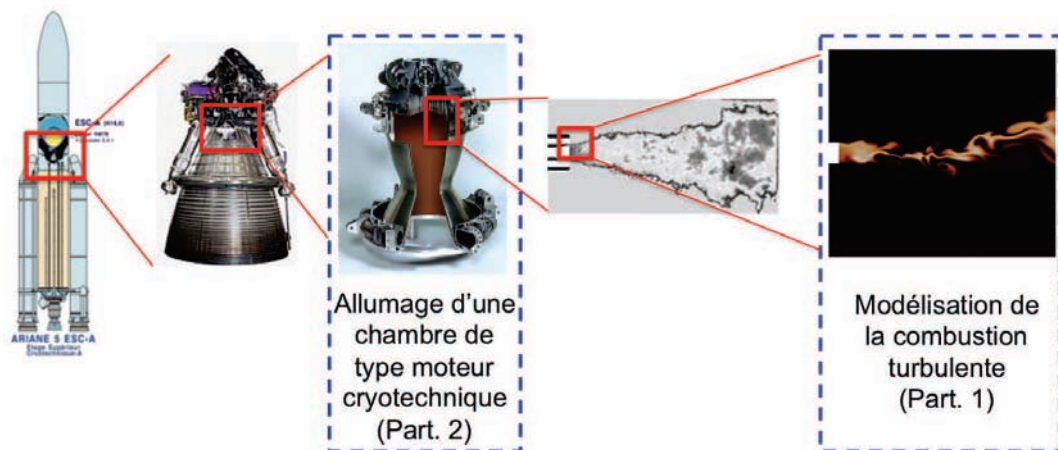


FIGURE 2.16 - Contexte de ces travaux et configurations étudiées (rectangles bleus). De gauche à droite : fusée Ariane 5, moteur complet Vulcain 2, coupe chambre Vulcain 2, vue OH-PLIF injection H_2/O_2 [Juniper, 2001], calcul couche de mélange turbulente (Chap. 5).

Deuxième partie

Modélisation de la combustion turbulente dans les chambres de moteurs fusées

Introduction

La configuration de moteur cryotechnique retenue pour l'étude d'allumage utilise le couple de réactifs H_2/O_2 . A cela s'ajoute le caractère instationnaire de l'écoulement que l'on cherche à étudier, créant différents types de régimes de combustion. Dans le cadre du calcul LES d'une telle configuration, il est nécessaire de s'assurer que les modèles utilisés permettront de traiter tous les phénomènes rencontrés. Après avoir présenté les équations utilisées pour la résolution des écoulements compressibles réactifs en LES (Chap. 3), cette partie s'intéressera à différents points de validation quant à la modélisation de la combustion turbulente. Le Chap. 4 discutera d'un modèle de cinétique chimique du couple H_2/O_2 adapté pour un calcul 3D d'allumage. Cette étude s'intéressera en particulier aux récents résultats de Boivin initialement développés pour la combustion du couple H_2/Air . Une fois l'aspect cinétique traité, le Chap. 5 se penchera sur le modèle de combustion turbulente. Le modèle de combustion TFLES du code AVBP ayant été initialement développé pour traiter les régimes prémélangés et partiellement prémélangés, le Chap. 5 présentera une méthode alternative plus spécifique aux flammes non-prémélangées turbulentes. Pour pouvoir profiter d'une utilisation conjointe de ces deux modèles, le Chap. 6 étudiera la possibilité de distinguer ces deux régimes de combustion afin de pouvoir mieux les traiter dans un calcul LES.

Equations et modélisation de la combustion turbulente

Sommaire

Introduction	47
2.1 Structure du jet coaxial non-réactif	48
2.1.1 Généralités	49
2.1.2 Différents régimes de brisure de jet	50
2.1.2.1 Longueur du dard liquide	52
2.1.2.2 Angle du spray	53
2.1.3 Atomisation primaire	53
2.1.4 Atomisation secondaire	54
2.2 Structure de flamme	56
2.2.1 Pression subcritique	57
2.2.2 Pression supercritique	57
2.2.3 Effet du retrait du tube central	58
2.3 Stabilisation de flamme	61
2.4 Allumage en configuration académique	61
2.4.1 Quatre phases	62
2.4.2 Trois scénarios	64
2.5 Calculs de configurations industrielles	65
2.5.1 Études 2D	65

3.1 Introduction

Ce chapitre présente brièvement les équations de la phase gazeuse et de la phase liquide (en formalisme eulérien) qui décrivent les écoulements réactifs turbulents. La première partie en définit les équations exactes. L'introduction de la notion de turbulence permettra d'aborder les concepts de modélisation en terme d'échelle de la turbulence, en présentant le code AVBP. La troisième partie expose brièvement le code Cantera pour les flammes stationnaires prémélangées et non-prémélangées, 0D ou 1D. Les définitions et notations sont tirées de l'ouvrage de Poinso et Veynante [Poinso and Veynante, 2005], du manuel d'AVBP [AVBP,], et des travaux de Boileau [Boileau, 2007]. De plus amples explications sur les différents termes des équations et sur les modèles utilisés pourront y être trouvées.

3.2 Généralités sur la combustion

Le mélange

L'étude de la combustion implique l'étude d'un fluide multi-espèce. L'espèce k au sein d'un mélange peut-être caractérisée par les quantités suivantes :

- Sa fraction de mélange Y_k définie par $Y_k = m_k/m$, où m est la masse totale et m_k la masse de l'espèce k .
- Sa masse molaire W_k , qui permet de relier sa fraction molaire $X_k = Y_k W/W_k$ à sa fraction massique et sa concentration molaire $[X_k] = \rho X_k/W$ avec W la masse molaire moyenne du mélange.
- Sa masse volumique partielle $\rho_k = \rho Y_k$.
- Sa capacité calorifique à pression constante C_p^k .
- Son enthalpie sensible $h_{sk} = \int_{T_0}^T C_p^k dT$ (avec T la température et T_0 une température de référence) et son enthalpie standard de formation $\Delta h_{f,k}^o$ qui forment son enthalpie $h_k = h_{sk} + \Delta h_{f,k}^o$.

Pour un mélange de N espèces, les quantités définies précédemment sont liées par la loi des gaz parfaits :

$$p = \sum_{k=1}^N p_k = \sum_{k=1}^N \rho_k R T / W_k \quad (3.1)$$

où T est la température du mélange et $R = 8,314 \text{ J/mol/K}$ est la constante des gaz parfaits. La masse volumique du mélange étant définie par :

$$\rho = \sum_{k=1}^N \rho_k \quad (3.2)$$

on obtient l'équation d'état :

$$p = \rho \frac{R}{W} T \quad (3.3)$$

avec

$$\frac{1}{W} = \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{W_k} \quad (3.4)$$

Le transport

Les coefficients de diffusivité thermique et moléculaire sont respectivement notés D_{th} et D_k . La définition de D_{th} (Eq. 3.5) utilise le coefficient de conduction thermique λ . Quant à celle de D_k , elle doit tenir compte, d'après la théorie cinétique [Hirschfelder et al., 1954], des coefficients de diffusivité moléculaire binaire D_{jk} entre l'espèce k et chacune des autres espèces j . La valeur de D_k dans le mélange est calculée par la relation (3.6) [Bird et al., 1960].

$$D_{th} = \frac{\lambda}{\rho C_p} \quad (3.5)$$

$$D_k = \frac{1 - Y_k}{\sum_{j \neq k} (X_j D_{jk})} \quad (3.6)$$

La vitesse de diffusion V_k de l'espèce k est définie par la relation 3.7, la conservation de la masse étant assurée par l'ajout d'une vitesse de correction V_k^c (Eq. 3.8).

$$V_{k,i} = -D_k \frac{\nabla X_k}{X_k} + V_{k,i}^c \quad (3.7)$$

$$\text{avec } V_{k,i}^c = \sum_{m=1}^N D_m \frac{W_m}{W} \frac{\partial X_m}{\partial x_i} \quad (3.8)$$

Ces coefficients de transport permettent de définir trois nombres adimensionnés qui seront utilisés dans la suite de l'étude : le nombre de Lewis Le_k de l'espèce k (3.9) qui compare le coefficient de transport de chaleur au coefficient de transport moléculaire de l'espèce k , le nombre de Prandtl Pr (3.10) qui compare la diffusivité de quantité de mouvement à la diffusivité thermique et le nombre de Schmidt Sc_k de l'espèce k (3.11) qui compare la diffusivité de quantité de mouvement à la

diffusivité moléculaire. On note ν la viscosité cinématique et $\mu = \rho\nu$ la viscosité dynamique.

$$Le_k = \frac{\lambda}{\rho C_p D_k} = \frac{D_{th}}{D_k} \quad (3.9)$$

$$Pr = \frac{\nu}{\lambda/(\rho C_p)} = \frac{\mu C_p}{\lambda} \quad (3.10)$$

$$Sc_k = \frac{\nu}{D_k} = Pr Le_k \quad (3.11)$$

La viscosité dynamique peut être modélisée par la loi de Sutherland (3.12) ou une loi puissance (3.13).

$$\text{Loi de Sutherland : } \mu = \mu_0 \frac{T^{3/2}}{T + c_2} \frac{T_{ref} + c_2}{T_{ref}^{3/2}} \quad (3.12)$$

$$\text{Loi puissance : } \mu = \mu_0 \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^{c_2} \quad (3.13)$$

La cinétique chimique

Un mécanisme cinétique est un système de M réactions impliquant N espèces définies par :

$$\sum_{k=1}^N \nu'_{kj} \mathcal{M}_k \rightleftharpoons \sum_{k=1}^N \nu''_{kj} \mathcal{M}_k \text{ pour } j = 1, M \quad (3.14)$$

où \mathcal{M}_k représente l'espèce k , ν'_{kj} et ν''_{kj} sont les coefficients stœchiométriques molaires de l'espèce k dans la réaction j . La conservation de la masse est assurée par :

$$\sum_{k=1}^N \nu'_{kj} W_k = \sum_{k=1}^N \nu''_{kj} W_k \text{ ou } \sum_{k=1}^N \nu_{kj} W_k = 0 \text{ avec } \nu_{kj} = \nu''_{kj} - \nu'_{kj} \text{ pour } j = 1, M \quad (3.15)$$

Le taux de réaction massique $\dot{\omega}_k$ de l'espèce k est la somme des taux de réaction des M réactions.

$$\dot{\omega}_k = \sum_{j=1}^M \dot{\omega}_{kj} = W_k \sum_{j=1}^M \nu_{kj} \mathcal{Q}_j \quad (3.16)$$

où \mathcal{Q}_j est le taux d'avancement de la j -ème réaction, et peut être écrit :

$$\mathcal{Q}_j = K_{fj} \prod_{k=1}^N [X_k]^{\nu'_{kj}} - K_{rj} \prod_{k=1}^N [X_k]^{\nu''_{kj}} \quad (3.17)$$

où K_{fj} et K_{rj} sont respectivement les coefficients de vitesse de la réaction j directe et de la réaction j inverse. On sera amené à utiliser les notations \mathcal{Q}_{fj} et \mathcal{Q}_{rj} pour les taux d'avancement respectifs de la réaction j directe et j inverse. La loi empirique d'Arrhénius donne une expression simplifiée de ces vitesses ¹ :

$$K_{fj} = A_{fj} T^{\beta_j} \exp\left(\frac{E_j}{RT}\right) \quad (3.18)$$

3.3 Equations conservatives

3.3.1 La phase gazeuse

Conservation de la masse

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3.19)$$

avec u_i la i -ème composante du vecteur vitesse.

Conservation de la quantité de mouvement

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_i} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{kj} \quad (3.20)$$

où f_{kj} est la force volumique sur l'espèce k dans la direction j , et où le tenseur des contraintes σ_{ij} est défini comme la somme du tenseur des contraintes visqueuses τ_{ij} et du tenseur des contraintes de pression $p\delta_{ij}$:

$$\sigma_{ij} = \tau_{ij} - p\delta_{ij} = -p\delta_{ij} - \frac{2}{3}\mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.21)$$

avec δ_{ij} le symbole de de Kronecker.

1. Cette expression connaît des cas particuliers qui seront rencontrés dans les cinétiques étudiées (voir plus loin tab. 4.1, tab.4.2 et tab.4.3) :

- La réaction à trois corps de type $A + B + M \rightarrow AB + M$: le calcul du taux d'avancement est modifié par la relation $K_f[A][B][M]$ où $[M]$ est défini par $[M] = \sum_k \epsilon_k [X_k]$, ϵ_k étant les efficacités de Chaperon attribuées à chaque espèce pour la réaction concernée.
- La réaction de *Fall off* : le taux de réaction d'ordre 1 en $[M]$ (comme les réactions à trois corps) à basse pression tend à être d'ordre 0 en $[M]$ lorsque $[M]$ augmente. La formulation devient plus complexe. On utilise les paramètres à la limite haute de pression ($k_\infty = A_\infty T^{\beta_\infty} \exp(-E_\infty/RT)$) et la limite basse de pression ($k_0 = A_0 T^{\beta_0} \exp(-E_0/RT)$) pour définir $K_f(T, P_r) = k_\infty \left(\frac{P_r}{1+P_r} \right) F(T, P_r)$ où $P_r = k_0[M]/k_\infty$ est la pression réduite et $F(T, P)$ est la fonction de *Fall off*.

Conservation des espèces

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho Y_k (u_i + V_{k,i})) = \dot{\omega}_k \text{ pour } k=1,N \quad (3.22)$$

avec la vitesse de diffusion de l'espèce V_k définie précédemment par la relation (3.7). On obtient donc :

$$Y_k V_{k,i} = X_k \frac{W_k}{W} V_{k,i} = -D_k \frac{W_k}{W} \nabla X_k + Y_k V_{k,i}^c \quad (3.23)$$

Conservation de l'énergie

$$\rho \frac{De_t}{Dt} = \frac{\partial \rho e_t}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i e_t}{\partial x_i} = -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma_{ij} u_i}{\partial x_j} + \dot{Q} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,i} (u_i + V_{k,i}) \quad (3.24)$$

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \rho \sum_{k=1}^N h_k Y_k V_{k,i} \quad (3.25)$$

Il existe plusieurs formulations pour définir la conservation de l'énergie. La formulation de l'énergie totale e_t est donnée par Kuo [Kuo, tion] par la relation (3.24) où q_i est le flux d'énergie composé de la loi de Fourier et d'un second terme utilisant la diffusion et l'enthalpie des espèces (Eq. 3.25).

On utilise aussi l'énergie totale non chimique E , que l'on dérive de e_t grâce à la relation (3.26) pour obtenir l'équation (3.27). Cette formulation fait apparaître le taux de dégagement de chaleur $\dot{\omega}_T$ (Eq. (3.28)), et le flux d'énergie non chimique $q_{s,i}$ (Eq. (3.29)).

$$E = e_t - \sum_{k=1}^N \Delta h_{f,k}^o Y_k \quad (3.26)$$

$$\rho \frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i E) = -\frac{\partial q_{s,i}}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma_{ij} u_i}{\partial x_j} + \dot{\omega}_T + \dot{Q} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,i} (u_i + V_{k,i}) \quad (3.27)$$

$$\dot{\omega}_T = -\sum_{k=1}^N \Delta h_{f,k}^o \dot{\omega}_k \quad (3.28)$$

$$q_{s,i} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \rho \sum_{k=1}^N h_{s,k} Y_k V_{k,i} \quad (3.29)$$

3.3.2 La phase liquide

Formalisme eulérien

La description de l'évolution de chaque particule est remplacée par la description des propriétés moyennes (au sens statistique) du spray, en assimilant le spray à un fluide continu. Pour obtenir

les moments statistiques, il n'est pas nécessaire d'introduire une longueur caractéristique [Février et al., 2005, Simonin et al., 2002] à l'inverse des opérateurs de filtrage spatial qui aboutissent à un système d'équations très proches mais qui introduisent une notion de taille de filtre [Simonin, 1996, Kaufmann, 2004]. C'est cette approche qui a été choisie dans le code AVBP et qui est résumée ci-dessous.

Fonctions de présence et de moyenne

Cette méthode utilise une fonction de densité de présence f_p dont la représentation peut être expliquée de la manière suivante : soit H_f un écoulement gazeux avec une répartition aléatoire de particules à l'instant t_0 . On définit la réalisation i par l'évolution de l'écoulement de l'instant t_0 à l'instant t_1 . Sur cette réalisation i , on mesure le nombre de particules $f_p^i(c_p, \mu_p, \zeta_p, x, t, H_f)$ possédant à la fois une vitesse c_p , une masse μ_p et une température ζ_p en tout point x , à tout instant t . On définit alors une fonction de densité de probabilité (FDP) en moyennant ce procédé sur un grand nombre N_p de réalisation H_f , ce qui donne $f_p = 1/N_p \sum_{i=1}^{N_p} f_p^i$. La fonction obtenue $f_p(c_p, \mu_p, \zeta_p, x, t, H_f)$ représente le nombre probable de particules dans un écoulement H_f , au point x , à l'instant t , dont la vitesse u_p , la température T_p et la masse m_p vérifient : $c_p \leq u_p \leq c_p + dc_p$, $\mu_p \leq m_p \leq \mu_p + d\mu_p$ et $\zeta_p \leq T_p \leq \zeta_p + d\zeta_p$. On définit une moyenne de Favre d'une fonction particulière quelconque $\Psi(u_p, T_p, m_p)$ de la même manière que la moyenne de Favre en gazeux, en la pondérant par la masse.

$$\check{\Psi} = \langle \Psi \rangle_l = \frac{1}{\rho_l \check{\alpha}_l} \int \mu_p \Psi f_p dc_p d\zeta_p d\mu_p \quad (3.30)$$

où ρ_l est la masse volumique de liquide et $\check{\alpha}_l$ est la fraction volumique de la phase dispersée dans le gaz. Dans le cas d'un spray monodisperse, on a $m_p = \rho_l \frac{\pi}{6} d^3 = cste$ en un point x à l'instant t avec d le diamètre de particule. On peut définir une relation simple entre $\check{\alpha}_l$ et la densité de particules \check{n}_l :

$$\check{\alpha}_l = \frac{\pi}{6} \check{n}_l d^3 \quad (3.31)$$

$$= \frac{\pi d^3}{6} \int f_p dc_p d\zeta_p d\mu_p \quad (3.32)$$

Pour la vitesse particulaire u_p , on obtient une vitesse moyenne eulérienne appelée *vitesse mésoscopique* \check{u}_l . Pour une particule unique, sa vitesse u_p est définie par :

$$u_p = \check{u}_l + u_p'' \text{ avec } \langle u_p'' \rangle_l = 0 \quad (3.33)$$

où u_p'' est la *vitesse décorrélée* de la particule par rapport au spray.

Hypothèses simplificatrices

- H1 :** Les particules sont des gouttes sphériques indéformables.
- H2 :** Le rapport de masse volumique entre le liquide ρ_l et le gaz ρ_g permet de supposer que la seule force exercée par le fluide porteur sur les gouttes est la traînée.
- H3 :** La température T_l (donc l'enthalpie sensible) est homogène à l'intérieur de chaque goutte. Cela revient à supposer une conductivité infinie dans la phase liquide.
- H4 :** L'effet de la gravité est négligeable.
- H5 :** La phase dispersée est diluée (la fraction volumique de liquide $\check{\alpha}_l < 0,01$) et la fraction volumique du gaz vaut $1 - \check{\alpha}_l \equiv 1$.
- H6 :** Les interactions goutte-goutte sont négligeables.
- H7 :** La phase porteuse est faiblement altérée par la présence du spray ce qui permet d'utiliser une fonction de densité de probabilité conditionnée par une réalisation unique de la phase porteuse.
- H8 :** Toutes les gouttes possèdent localement le même diamètre d : le spray est monodisperse.
- H9 :** Toutes les gouttes possèdent localement la même température T_l .

Équations de conservation

Les équations de conservation de la densité en nombre de particules (3.34), de la fraction volumique (3.35), de la quantité de mouvement (3.36) et de l'enthalpie sensible (3.37) sont présentées ci-dessous :

$$\frac{\partial}{\partial t} \check{n}_l + \frac{\partial}{\partial x_i} \check{n}_l \check{u}_{l,i} = 0 \quad (3.34)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_l \check{\alpha}_l + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_{l,i} = -\Gamma \quad (3.35)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_{l,i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_{l,i} \check{u}_{l,j} = \Gamma \check{u}_{l,i} + F_{d,i} \quad (3.36)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_l \check{\alpha}_l \check{h}_{s,l} + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_{l,i} \check{h}_{s,l} = -\Gamma \check{h}_{s,l} + \Phi_l \quad (3.37)$$

$$\text{temporel} + \text{mvt mésoscopique} = \text{évaporation} + \text{traînée} + \text{conduction} \quad (3.38)$$

avec le terme de traînée F_d défini par l'équation :

$$F_{d,i} = \rho_l \check{\alpha}_l \frac{u_i - \check{u}_{l,i}}{\tau_p} \quad (3.39)$$

$$\text{avec } \tau_p = \frac{\rho_l d^2}{18\mu} \quad (3.40)$$

Le terme d'évaporation Γ est défini par l'équation (3.41) avec le nombre de Schmidt du composant de la phase liquide sous sa forme gazeuse Sc_F ,

$$\Gamma = \pi \check{n}_l d Sh \frac{\mu}{Sc_F} \ln(1 + B_M) \quad (3.41)$$

$$\text{Nombre de Sherwood : } Sh = 2 + 0.55 Re_l^{1/2} Sc_F^{1/3} \quad (3.42)$$

$$\text{Nombre de Reynolds de goutte : } Re_l = \frac{\rho |u - u_l| d}{\mu} \quad (3.43)$$

$$\text{Nombre de Spalding de masse : } B_M = \frac{Y_{F,interface} - Y_{F,\infty}}{1 - Y_{F,interface}} \quad (3.44)$$

où $Y_{F,interface}$ et $Y_{F,\infty}$ sont les fractions massiques de fuel respectivement à la surface de la goutte et dans la phase gazeuse [Boileau, 2007]. Le taux de transfert de chaleur par conduction thermique vers le liquide Φ_l est défini à partir des taux de transfert de chaleur par changement de phase vers le gaz Λ , vers le liquide Λ_l et par conduction thermique vers le gaz Φ , avec $h_{s,F}$ l'enthalpie de la phase gazeuse :

$$\Phi_l = -(\Lambda + \Phi + \Lambda_l) \quad (3.45)$$

$$\Lambda = \Gamma h_{s,F}(\check{T}_l) \quad (3.46)$$

$$\Lambda_l = -\Gamma \check{h}_{s,l} \quad (3.47)$$

$$\Phi = \pi \check{n}_l d Nu \lambda(\check{T}_l - T_\infty) \frac{\ln(B_T + 1)}{B_T} \quad (3.48)$$

$$\text{Nombre de Spalding de température : } B_T = (1 + B_M)^{Sh/(Nu Le_F)} - 1 \quad (3.49)$$

$$\text{Nombre de Lewis de l'espèce évaporante : } Le_F = Sc_F / Pr \quad (3.50)$$

$$\text{Nombre de Nusselt : } Nu = 2 + 0.55 Re_l^{1/2} Pr^{1/3} \quad (3.51)$$

3.4 Notions de turbulence

On se propose de décrire brièvement le concept de turbulence, bien qu'il n'y ait pas de définition claire. Des nombreux écrits consultés, on retiendra une citation du cours de L. Jacquin pour décrire de manière très simple ce phénomène : "La turbulence *mélange* et *dissipe*" [Jacquin and Tabeling, 2006]. La turbulence est un phénomène complexe qui caractérise d'une part une fluctuation des propriétés d'un écoulement au travers de structures tourbillonnaires, et d'autre part une dissipation de l'énergie cinétique en chaleur. Pour une structure de taille et de vitesse caractéristique r et $u'(r)$, on définit le nombre de Reynolds Re , qui représente le rapport entre les forces d'inertie et

visqueuse, et le temps caractéristique $\tau_m(r)$ de la structure :

$$Re = \frac{u'(r)r}{\nu} \quad (3.52)$$

$$\tau_m(r) = \frac{r}{u'(r)} \quad (3.53)$$

Dans le cas d'une turbulence homogène isotrope, les valeurs maximales et minimales de Re permettent de définir des grandeurs caractéristiques de l'écoulement :

- La valeur maximale $Re = Re_t$ est obtenue pour les structures qui ont la plus grande taille, appelée **échelle intégrale** l_t . On notera la vitesse caractéristique correspondante u'_t .
- La valeur minimale $Re = 1$ est obtenue pour la plus petite taille de structure, appelée **échelle de Kolmogorov** η_k . On notera la vitesse caractéristique correspondante u'_k .

Cette valeur minimale de Re n'est pas anodine, elle correspond à l'échelle des structures pour lesquelles le terme visqueux est aussi important que le terme d'inertie. La viscosité dissipe donc l'énergie de la structure et la détruit. Il ne peut donc pas y avoir de structures turbulentes plus petites car le terme de viscosité serait alors plus fort que celui d'inertie. Pour compléter ces définitions, il reste à définir le lien entre ces valeurs l_t et η_k .

3.4.1 Le cas 3D

Dans le cas d'une turbulence homogène isotrope, Richardson [Richardson, 1922] puis Kolmogorov [Kolmogorov, 1941] proposent un mécanisme qui permet d'expliquer la diminution de la taille des structures turbulentes nommée la **cascade d'énergie** que l'on peut résumer en quatre points [Jacquin and Tabeling, 2006] :

- La turbulence est un ensemble de structures imbriquées, qui se brisent en structures plus petites.
- L'énergie cinétique des plus grandes structures (caractérisées par u'_t et l_t) est transférée aux structures de plus petite taille à un taux $\varepsilon_t = u'^3_t/l_t$. On définit le temps caractéristique (ou de vie) des grandes structures par $\tau_t = l_t/u'_t$.
- L'énergie est dissipée, toujours au taux ε_t , à l'échelle de Kolmogorov η_k . C'est le **régime visqueux** où l'énergie est transformée en chaleur.
- Pour une structure de taille intermédiaire $l_t \gg l \gg \eta_k$ (et de vitesse u'), on définit le **régime inertiel**, pour lequel un principe d'*autosimilarité* régit le transfert d'énergie, ie. de la même manière pour chaque échelle l et localement, l'énergie d'une structure est transféré en intégralité aux sous-structures qu'elle crée à la fin de son temps de vie. Ce processus n'est pas influencé par la viscosité, il est entièrement inertiel. **Le taux de transfert local de l'énergie est constant** et vaut $\varepsilon = u'^3/l = u'^3_t/l_t = u'^3_k/\eta_k$.

De ces différentes définitions découlent les relations suivantes :

$$\eta_k = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{1/4} \quad (3.54)$$

$$\frac{l_t}{\eta_k} = Re_t^{3/4} \quad (3.55)$$

Les développements de Kolmogorov dans le cas d'une turbulence homogène isotrope donnent une expression de la distribution spectrale de l'énergie $E(k) = \varepsilon^{2/3} k^{-5/3}$ dans le domaine inertiel (Fig. 3.1 a).

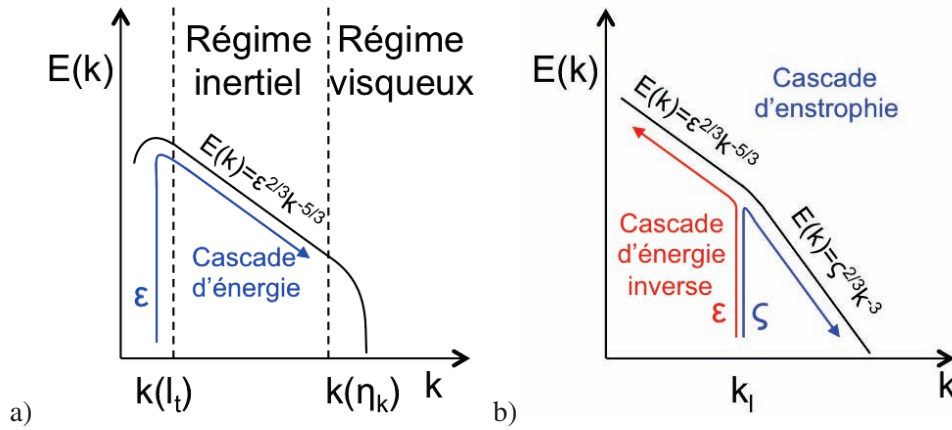


FIGURE 3.1 - Spectre de l'énergie turbulente en fonction du nombre d'onde k en échelle Log-Log dans le cas 3D a) et 2D b)

3.4.2 Le cas 2D

Les premiers à avoir adapté le développement 3D de Kolmogorov [Kolmogorov, 1941] au cas 2D sont Kraichnan [Kraichnan, 1967] et Leith [Leith, 1968]. Dans ce cas, le modèle de cascade d'énergie de Richardson-Kolmogorov ne peut pas être appliqué car il n'y a pas de mécanisme d'étirement tridimensionnel. A la place, le modèle Kraichnan-Leith propose deux comportements qui agissent en même temps et qui utilisent la notion d'enstrophie Z , définie par :

$$Z = \frac{1}{2} \int \omega^2 d^2x = \int k^2 E(k) dk \quad (3.56)$$

$$\text{où } \omega = \nabla \times u \text{ est la vorticité} \quad (3.57)$$

En injectant au voisinage du nombre d'onde k_l une énergie au taux constant ε et une enstrophie au taux constant $\zeta = k_l^2 \varepsilon$, on obtient (Fig. 3.1 b) :

- une cascade inverse de l'énergie qui transporte l'énergie vers les échelles plus grandes, ie $k < k_l$. La distribution spectrale de l'énergie donne encore $E(k) = \varepsilon^{2/3} k^{-5/3}$ pour des nombres d'onde inférieurs à k_l dans le domaine inertiel.
- une cascade de l'enstrophie, qui transfère l'enstrophie vers l'échelle de dissipation η_k , ie $k_l < k < k_\eta$. La distribution spectrale de l'énergie donne $E(k) = \zeta^{2/3} k^{-3}$ dans le domaine inertiel.

Ce comportement explique que l'énergie cinétique n'est pas dissipée par les petites échelles dans le cas 2D, et sera même conservée dans le cas d'une viscosité nulle ($\nu = 0$).

On pourra trouver des explications plus détaillées dans les travaux de thèse de Le Roy [LeRoy, 1988].

3.4.3 Coût d'un calcul turbulent

On reprend ici une analyse rapide [Jacquin and Tabeling, 2006] permettant d'évaluer le coût de résolution complète d'un écoulement turbulent 3D. Prenons un domaine cubique de côté L_x (on pourra prendre $L_x \geq 3 \times l_t$??), avec des mailles cubiques, le nombre d'éléments N_p serait proportionnel à :

$$N_P = \left(\frac{l_t}{\eta_k} \right)^3 = Re_t^{9/4} \quad (3.58)$$

Il est aussi possible d'estimer le nombre de pas de temps N_t nécessaire pour un temps de vie d'une grande structure. N_t sera proportionnel au rapport des temps de vie des grandes et des petites structures :

$$N_T = \frac{\tau_t}{\tau_k} = Re_t^{1/2} \quad (3.59)$$

Un tel calcul coûterait $N_P \times N_t = Re_t^{11/4} \sim Re_t^3$ points à calculer. Un écoulement simple peut être considéré comme turbulent à partir de $Re_t \sim 3000$, ce qui donnerait un coût raisonnable de 10^6 points sur 55 pas de temps. Un écoulement dans une configuration réelle industrielle peut demander un nombre de Reynolds $Re \sim 10^6$, qui coûterait plus de 10^{12} points ...

3.5 Différentes approches pour la simulation de la turbulence

La section précédente a présenté quelques bases pour l'étude de la turbulence. Ces notions vont permettre de choisir une approche adaptée aux différents calculs envisagés. Il existe trois principales manières d'effectuer la simulation d'un écoulement :

La DNS (Direct Numerical Simulation) ou Simulation Numérique Directe, résout toutes les échelles de l'écoulement (Fig. 3.2). Cette méthode permet d'une part de résoudre des problèmes

instationnaires, et d'autre part de considérer la solution comme exacte². Ces deux propriétés permettent d'obtenir des résultats détaillés sur des problèmes canoniques comme par exemple la turbulence homogène isotrope. Cependant, cette précision a un coût en termes d'espace de stockage et de capacité de calcul, qui limite pour l'instant son application à des problèmes de petite taille. L'évolution rapide des capacités de calcul et des codes démontre tout de même que les domaines d'utilisation vont peu à peu s'agrandir. Le calcul DNS de la chambre Preccinsta par Moureau et al. [Moureau et al., 2011] en est un bon exemple.

La LES (Large Eddy Simulation) ou Simulation aux Grandes Echelles, apporte une solution alternative au coût de calcul de la DNS, en ne résolvant que les grandes échelles de la turbulence, jusqu'à une certaine échelle de coupure l_{cut} (de l'ordre de deux à trois fois la taille de maille). Dans le domaine spectral de la Figure 3.2, on représente le nombre d'onde de coupure k_{cut} , qui représente la taille du plus petit tourbillon injecté dans le domaine, comme dans le cas d'une Turbulence homogène isotrope THI par exemple. La contribution des échelles au dessous de k_{cut} est calculée grâce à des modèles. La LES filtre localement en espace sur de petites zones autour de chaque point, mais donne une solution qui varie au cours du temps. La particularité de la LES est de pouvoir converger vers un résultat DNS lorsque l'échelle de coupure tend vers l'échelle de Kolmogorov (sous réserve d'utiliser de bons modèles).

Le RANS (Reynolds Averaged Navier Stokes) est une méthode encore beaucoup utilisée en industrie. Son principe consiste à calculer une moyenne statistique de l'écoulement, en modélisant toutes les échelles de la turbulence (Fig. 3.2). Cette solution permet d'obtenir des résultats stationnaires de manière très rapide. Cependant, beaucoup de phénomènes instationnaires, en particulier en combustion, ne sont pas accessibles. Par exemple, l'étude de phénomène singuliers comme l'allumage ne peuvent être étudiés.

On notera que de nouvelles méthodes ont émergé ces dernières années, intermédiaires entre la LES et le RANS. Certaines méthodes hybrides visent à cumuler les avantages de la LES (instationnarité) à ceux du RANS (écoulement en proche paroi). Ces approches ne seront pas détaillées ici mais une synthèse extrêmement claire est disponible dans le cours de Davidson [Davidson, 2014]. Dans la mesure où l'on peut payer le coût de la LES (voir Sec. ??, p.??), on retiendra cette méthode pour les calculs de chambre de cette thèse. La DNS ne sera utilisée que sur des petites configurations permettant d'évaluer précisément la réponse de la cinétique chimique à la contrainte d'un écoulement.

3.6 Le code AVBP et les équations de la LES

Les équations présentées précédemment sont utilisées dans le cadre du calcul DNS (Direct Numerical Simulation), où l'ensemble des phénomènes entrant en jeu à toutes les échelles est résolu. Cette technique demande cependant une résolution spatiale très fine du domaine, ce qui limite son utilisation à de petits domaines de calcul. Pour des domaines plus grands et des géo-

2. A la condition d'utiliser un schéma d'ordre suffisamment élevé et sous réserve de bons modèles de combustion.

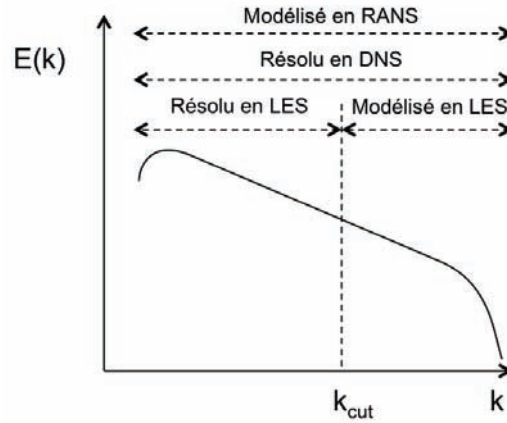


FIGURE 3.2 - Définition des domaines de fonctionnement des méthodes RANS, DNS et LES sur le spectre de l'énergie turbulente en fonction du nombre d'onde k en échelle Log-Log, avec l'échelle de coupure k_{cut} de la LES.

métries plus complexes comme les chambres de combustion industrielles, la méthode LES (Large Eddy Simulation) est préférable. Dans cette étude, le code AVBP co-développé par le CERFACS et IFPEN a été utilisé pour les calculs LES. C'est un code parallèle qui résout les équations de Navier-Stokes pour des écoulements compressibles et réactifs sur les maillages non-structurés et hybrides. La structure de données d'AVBP utilise une approximation *volumes finis* avec stockage aux noeuds ("cell-vertex"). Les méthodes numériques sont basées sur un schéma de Lax-Wendroff ou de Taylor-Galerkin de type éléments finis à faible dissipation, combinées à un modèle de viscosité artificielle. Le principe de la LES ainsi que les équations utilisées dans AVBP sont présentés ci-dessous.

3.6.1 Principe de la LES

Comme expliqué précédemment, la LES consiste à résoudre uniquement les équations pour les phénomènes de grande échelle, jusqu'à une échelle de coupure fixée par la taille du filtre spatial. L'effet des échelles qui sont plus petites que l'échelle de coupure est modélisé. La particularité de cette méthode est de converger vers la DNS lorsque la taille du filtre diminue, la DNS étant le cas particulier où l'échelle de coupure est inférieure à la plus petite échelle entrant en jeu. La quantité filtrée \bar{f} est définie par la relation (3.60) où F est le filtre LES. Dans le cas où la masse volumique

est variable, le filtrage de Favre conditionné par la masse est défini par la relation (3.61).

$$\bar{f} = \int f(x') F(x - x') dx' \quad (3.60)$$

$$\overline{\rho f} = \bar{\rho} \tilde{f} = \int \rho f(x') F(x - x') dx' \quad (3.61)$$

La quantité \bar{f} est la quantité résolue par la simulation alors que $f' = f - \bar{f}$ est la quantité non-résolue (qui correspond à la quantité de sous-maille, on en modélisera qu'un effet statistique). Il en est de même pour la phase dispersée, la moyenne de Favre d'une fonction eulérienne mésoscopique \tilde{f}_l s'obtenant par la relation :

$$\overline{\tilde{f}_l} = \bar{\alpha}_l \hat{f}_l \quad (3.62)$$

3.6.2 Modélisation de la phase gazeuse

En appliquant le filtrage de Favre (Eq. (3.61)) aux équations conservatives (3.19), (3.20), (3.22) et (3.27) présentées précédemment, on obtient le jeu d'équations pour la LES :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3.63)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) + \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} = - \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\tau}_{ij} - \bar{\rho} (\tilde{u}_i \tilde{u}_j - \tilde{u}_i \tilde{u}_j)] \quad (3.64)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{Y}_k \tilde{u}_i) = - \frac{\partial}{\partial x_i} [-\bar{\rho} V_{k,i} \tilde{Y}_k + \bar{\rho} (\tilde{u}_i \tilde{Y}_k - \tilde{u}_i \tilde{Y}_k)] + \bar{\omega}_k \quad (3.65)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{E}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{E} \tilde{u}_i) = - \frac{\partial}{\partial x_i} [(\bar{P} \delta_{ij} - \bar{\tau}_{ij}) \tilde{u}_i - \bar{q}_{s,i} - \bar{\rho} (\tilde{u}_i \tilde{E} - \tilde{u}_i \tilde{E})] + \bar{\omega}_T + \bar{\mathcal{Q}} \quad (3.66)$$

$$\text{avec } \bar{q}_{s,i} = -\lambda \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i} + \rho \sum_{k=1}^N h_{s,k} Y_k V_{k,i} \quad (3.67)$$

Certains termes dans ces équations ne peuvent être résolus directement. On choisit des modèles de fermeture pour les évaluer :

Le tenseur des contraintes de Reynolds non-résolu ($\tilde{u}_i \tilde{u}_j - \tilde{u}_i \tilde{u}_j$) demande un modèle de sous-maille pour reproduire les flux e quantité de mouvement entre les échelles résolues et non résolues de la turbulence. Ces modèles sont souvent développés pour des écoulements non réactifs comme les modèles de Smagorinsky [Pope, 2000], Smagorinsky dynamique [Germano et al., 1991], Wale [Ducros et al., 1998] ou Sigma [Nicoud et al., 2011]. On utilisera par la suite le modèle de Smagorinsky dynamique.

Les flux non-résolus d'espèces ($\tilde{u}_i \tilde{Y}_k - \tilde{u}_i \tilde{Y}_k$) **et de chaleur** ($\tilde{u}_i \tilde{E} - \tilde{u}_i \tilde{E}$) sont modélisés de la même manière que le tenseur des contraintes de Reynolds non-résolus [Moin et al., 1991], en introduisant un nombre de Schmidt turbulent Sc_t et un nombre de Prandtl turbulent Pr_t . Les valeurs

sont classiquement fixées ici à $Sc_t = 0,6$ et $Pr_t = 0,6$.

Les flux de diffusion filtrés pour les espèces et la chaleur peuvent être négligés devant les forts niveaux de turbulence, ou simplement modélisés par un gradient :

$$\overline{\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}} \approx \bar{\lambda} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i} \quad (3.68)$$

$$\overline{\rho V_{k,i} Y_k} \approx -\bar{\rho} \bar{D}_k \frac{\partial \bar{Y}_k}{\partial x_k} \quad (3.69)$$

Le choix de la loi de viscosité (Eq. 3.12 ou Eq. 3.13) ainsi que de μ_0 et c_2 , des nombres de Schmidt d'espèces Sc_k et du nombre de Prandtl Pr feront l'objet de la section 4.4.2.1.

Les taux de réaction filtrés $\bar{\omega}_k$ nécessitent plusieurs choix de modélisation. Dans un premier temps, il est nécessaire de choisir une description de la cinétique chimique. Puis, dans le cas de la LES, l'épaisseur d'une flamme étant souvent plus petite que la taille de maille, il faut choisir un modèle permettant de traiter la combustion en sous-maille. Dans le cas de l'hypothèse de flamelette, il faut tenir compte dans le cas turbulent d'un plissement du front de flamme à l'échelle de sous-maille, qui implique une augmentation de la surface de flamme et donc du taux de consommation. Les revues de Veynante et Vervisch [Veynante and Vervisch, 2002, Veynante and Vervisch, 2004] et plus récemment de Bilger [Bilger et al., 2005] donnent une très bonne description de l'ensemble des modèles disponibles pour traiter la combustion. Dans cette thèse, une cinétique chimique réduite sera utilisée et détaillée dans le Chapitre 4. Le modèle de flamme épaissie (TFLES) sera utilisé pour traiter la combustion prémélangée de sous-maille (cf chapitre 5). Bien que des travaux [Sengissen et al., 2007, Boileau et al., 2008b, Boileau et al., 2008a, Schmitt et al., 2011] montrent des résultats intéressants dans le cas de flammes non-prémélangées, le modèle TFLES n'est en théorie pas adapté aux flammes de diffusion. Les travaux du Chapitre 5 présenteront une méthode de modélisation plus adaptée à ce type de flamme.

3.6.3 Modélisation de la phase liquide

Dans le cas de la phase liquide, le filtrage LES appliqué aux termes d'échange gaz-liquide introduit des termes non fermés, qu'on simplifie de la façon suivante [Boileau, 2007] :

$$\text{Evaporation} - \bar{\Gamma} \tilde{u}_{l,i} \approx -\bar{\Gamma} \hat{u}_{l,i} \quad (3.70)$$

$$\text{Trainée} \quad \bar{F}_{d,i} \approx \bar{\rho}_l \bar{\alpha}_l \frac{\tilde{u}_i - \hat{u}_{l,i}}{\bar{\tau}_p} \quad (3.71)$$

$$(3.72)$$

Chaleur :

$$\text{par conduction thermique vers le liquide } \bar{\Phi}_l = -(\bar{\Lambda} + \bar{\Phi} + \bar{\Lambda}_l) \quad (3.73)$$

$$\text{par changement de phase vers le liquide } \bar{\Lambda}_l \approx -\bar{\Gamma}(\hat{h}_{s,l}) \quad (3.74)$$

$$\text{par changement de phase vers le gaz } \bar{\Lambda} \approx \bar{\Gamma} h_{s,F}(\hat{T}_l) \quad (3.75)$$

$$\text{par conduction thermique vers le gaz } \bar{\Phi} \approx \pi \bar{n}_l d \bar{Nu} \bar{\lambda}(\hat{T}_l - \tilde{T}) \frac{\ln(\bar{B}_T + 1)}{\bar{B}_T} \quad (3.76)$$

Concernant les flux turbulents de sous-maille (Eq. 3.77) modélisés par la relation (3.78), Moreau [Moreau, 2006] a montré la nécessité de prendre en compte les effets de compressibilité dans leur modélisation. Riber et al. [Riber et al., 2005] propose d'utiliser un modèle de type Smagorinsky (Eq. 3.80) [Smagorinsky, 1963] pour la partie déviatorique du tenseur de sous-maille des vitesses mésoscopiques, les effets compressibles étant représentés par la partie diagonale de ce tenseur avec un modèle de Yoshizawa (Eq. 3.81) [Yoshizawa, 1986].

$$\bar{\tau}_{l,ij}^t = -\rho_l \bar{\alpha}_l (u_{l,i} \hat{u}_{l,j} - \hat{u}_{l,i} u_{l,j}) \quad (3.77)$$

$$\approx 2\rho_l \bar{\alpha}_l \nu_{l,t} \left(\hat{S}_{l,ij} - \frac{1}{3} \hat{S}_{l,kk} \delta_{ij} \right) + 2\rho_l \bar{\alpha}_l \kappa_{l,t} \hat{S}_{l,ij} \delta_{ij} \quad (3.78)$$

$$\text{avec } \hat{S}_{l,ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \hat{u}_{l,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \hat{u}_{l,j}}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \frac{\partial \hat{u}_{l,k}}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (3.79)$$

$$\nu_{l,t} = (C_{S,l} \Delta)^2 \sqrt{2 \hat{S}_{l,ij} \hat{S}_{l,ij}} \quad (3.80)$$

$$\kappa_{l,t} = 2C_{V,l} \Delta^2 \hat{S}_{l,ij} \quad (3.81)$$

Les constantes du modèle sont fixées à partir de tests à priori [Moreau et al., 2005] : $C_{S,l} = 0,16$ et $C_{V,l} : 0,012$.

3.7 Le code CANTERA

CANTERA est un logiciel libre de droit dont le noyau est codé en C++ mais qui permet l'utilisation de programmes d'application en MATLAB, Python, C++ ou Fortran [Goodwin, J.]. CANTERA permet de résoudre des écoulements réactifs simples (0D et 1D) impliquant des cinétiques chimiques complexes, une thermodynamique et un processus de transport complexes. Le code est structuré en quatre parties (les équations d'état, le transport, la cinétique chimique et le mélange). **Les Équations d'état** traitent des propriétés thermodynamiques du mélange, ie la température, la pression, l'enthalpie, l'énergie interne, l'entropie et les potentiels chimiques. Par défaut, CANTERA ne gère que des gaz parfaits mais la structure du code permet l'ajout d'une thermodynamique différente.

Le Transport gère les propriétés telles que la viscosité, la conductivité thermique, les coefficients

de diffusion binaire et les coefficients de diffusion multi-composants. Il est possible d'implanter de nouvelles méthodes permettant de calculer les paramètres de transport. Par défaut, CANTERA propose deux méthodes :

- Le modèle utilisant les **propriétés du mélange moyen** est très similaire au modèle du mélange moyen décrit par Kee et al. [Kee et al., 1986]. Cette méthode est moins précise que la méthode multi-composants mais reste bien moins couteuse en terme de temps de calcul. Le coefficient de diffusion D_{im} de l'espèce i par rapport au mélange est évalué par la formule :

$$D_{im} = \frac{\sum_{j \neq i}^N X_j W_j}{W \sum_{j \neq i}^N X_j / D_{jk}} \quad (3.82)$$

D'un point de vue numérique, la formule sera mal définie pour une espèce pure. Une légère modification est apportée dans le code en introduisant une petite valeur $\varepsilon = 10^{-12}$ sur les concentrations.

Grâce à la formule semi-empirique de Wilke [Wilke, 1950] et modifiée par Bird et al. [Bird et al., 1960], la viscosité du mélange est obtenue à partir des propriétés des espèces pures par :

$$\eta = \sum_{k=1}^N \frac{X_k \eta_k}{\sum_{j=1}^N X_j \Upsilon_{kj}} \quad (3.83)$$

$$\text{avec } \Upsilon_{kj} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{W_k}{W_j} \right)^{-1/2} \left(1 + \left(\frac{\eta_k}{\eta_j} \right)^{1/2} \left(\frac{W_k}{W_j} \right)^{1/4} \right)^2 \quad (3.84)$$

La conductivité thermique du mélange moyen est obtenue par :

$$\lambda = \frac{1}{2} \left(\sum_{k=1}^N X_k \lambda_k + \frac{1}{\sum_{k=1}^N X_k / \lambda_k} \right) \quad (3.85)$$

- Le modèle calculant les **propriétés du mélange multi-composant** reprend la méthode de Kee et al. [Kee et al., 1986], et résout un système d'équations représenté par une matrice par blocs :

$$\begin{pmatrix} L^{00,00} & L^{00,10} & 0 \\ L^{10,00} & L^{10,10} & L^{10,01} \\ 0 & L^{01,10} & L^{01,01} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{00}^1 \\ a_{10}^1 \\ a_{01}^1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ X \\ X \end{pmatrix} \quad (3.86)$$

Les coefficients de diffusions moléculaires sont obtenus par :

$$D_{i,j} = X_i \frac{16TW}{25pW_j} (P_{ij} - P_{ii}) \text{ avec } (P) = (L^{00,00-1}) \quad (3.87)$$

Les coefficients de conductivité thermique sont solution du système :

$$\lambda_0 = - \sum_{k=1}^N N X_k a_{k10}^1 - \sum_{k=1}^N N X_k a_{k01}^1 \quad (3.88)$$

Et les coefficients de diffusivité thermique sont donnés par :

$$D^T - k = \frac{8m_k X_k}{5R} a_{k00}^1 \quad (3.89)$$

Le détail des blocs de la matrice ne sera pas fait ici [Kee et al., 1986].

La Cinétique gère la partie des cinétiques chimiques en phase gazeuse, en calculant les taux d'avancement des réactions, les taux de création et de destruction des espèces et les constantes d'équilibre. Les schémas utilisés peuvent être réduits ou complexes. Des classes de fonctions sont déjà codées pour gérer les lois d'Arrhénius simples, et les réactions à trois corps ou encore les réactions dépendantes de la pression (Fall off).

Le Mélange est le modèle qui fait l'interface entre les trois précédents et l'interface utilisateur. Ce module est donc responsable du trafic de données et gère les entrées du problème comme les éléments et espèces du mélange considéré ainsi que la mise à jour des différentes propriétés du mélange.

Cette structure permet de gérer des cinétiques à grand nombre d'espèces et de réactions chimiques (le schéma Gri-30 comporte 53 espèces et 325 réactions) pour calculer des équilibres chimiques, évaluer les propriétés thermodynamiques et de transport d'un mélange, ou créer des simulateurs de procédés en utilisant des réseaux de réacteurs homogènes. Un algorithme de raffinement automatique de maillage est utilisé pour raffiner le maillage dans les zones de réaction là où de forts gradients sont détectés, ce qui permet de réduire le temps de calcul tout en préservant la précision des résultats. Le transport simplifié d'AVBP a été intégré dans CANTERA au cours de la thèse de Franzelli [Franzelli, 2011] afin de pouvoir comparer directement les résultats obtenus avec les deux codes. Dans les chapitres suivants, le code CANTERA a été utilisé pour effectuer la majorité des calculs d'auto-allumage 0D, ainsi que les calculs de flammes stationnaires prémélangées et non-prémélangées 1D.

Cinétique chimique

4.1 Introduction

Ce chapitre vise à évaluer le schéma de cinétique chimique adapté à la combustion H_2/O_2 dans les conditions de moteurs fusées. Dans les travaux de Lacaze [Lacaze, 2009], un schéma cinétique réduit H2O2-GL7-1 à sept étapes a été utilisé. Ce schéma est confronté ici aux récents travaux de Boivin et al. [Boivin et al., 2011], qui a réduit le schéma détaillé de San Diego [Saxena and Williams, 2006] à vingt-et-une étapes en un schéma squelette H_2/air à douze étapes, puis en un schéma cinétique H_2/air à trois étapes. Ce dernier a été obtenu par l'approche des états quasi-stationnaires, où les coefficients des réactions finaux sont obtenus de manière analytique à partir des coefficients du mécanisme original. Les mécanismes de San Diego et Boivin à douze étapes servent de référence pour caractériser le schéma à trois étapes. Dans tout le chapitre, les calculs avec les schémas de San Diego et Boivin sont réalisés avec le code CANTERA [Goodwin,] tandis que ceux avec le schéma trois étapes sont réalisés avec le code AVBP [AVBP,]. En effet, il n'a pas été possible de faire converger le schéma trois étapes avec CANTERA.

4.2 Schémas cinétiques pour la combustion H2-O2

Cette section présente brièvement les mécanismes réactionnels de Lacaze [Lacaze, 2009], San-Diego [Petrova and Williams, 2006] et Boivin [Boivin, 2011]. Leurs caractéristiques et perfor-

mances sont comparées dans les sections suivantes.

4.2.1 Le schéma H2O2-GL7-1 (Lacaze [Lacaze, 2009])

Le schéma H2O2-GL7-1, développé au cours de la thèse de Lacaze [Lacaze, 2009], est adapté du schéma de Baurle [Baurle and Girimaji, 2003]. Il comporte sept étapes et utilise les cinq espèces H , O , H_2 , O_2 , OH et H_2O . Ce mécanisme réduit a été confronté au schéma détaillé de O'Connor, et à deux schémas réduits de Marinov [Marinov et al., 1996], l'un à une étape et l'autre à deux étapes. Le tableau 4.1 présente les coefficients d'Arrhenius pour le mécanisme H2O2-GL7-1.

	Réactions	A^a	n	E^a
1	$H + O_2 \rightleftharpoons O + OH$	$3.62e17$	-0.91	$1.653e4$
2	$O + O_2 \rightleftharpoons H + OH$	$1.53e5$	2.67	$6.296e3$
3	$O_2 + H_2 \rightleftharpoons OH + OH$	$5.13e13$	0.0	$4.805e4$
4	$OH + H_2 \rightleftharpoons H_2O + H$	$6.64e13$	0.0	$5.155e3$
5	$OH + OH \rightleftharpoons H_2O + O$	$1.90e13$	0.0	$1.091e3$
6	$H + OH + M \rightleftharpoons H_2O + M(b)$	$6.67e22$	-2.0	0.0
7	$H + H + M \rightleftharpoons H_2 + M(b)$	$2.20e18$	1.0	0.0

TABLE 4.1 - Coefficients des lois d'Arrhenius $k = AT^n \exp(-E/R^0T)$ pour le schéma sept étapes.

^a unités : mol, s, cm^3 , cal et K.

^b Efficacités de Chaperon : 2,5 pour H_2 , 16.0 pour H_2O et 1.0 pour les autres espèces.

4.2.2 Le schéma San Diego [Petrova and Williams, 2006]

Le mécanisme de San Diego [Petrova and Williams, 2006] est un schéma détaillé de référence pour la combustion de l'hydrogène, donnant d'excellents résultats en termes de vitesse de flamme prémélangée, de temps d'auto-allumage, de température de gaz brûlés et d'étirement d'extinction. Il est composé de vingt-et-une étapes réversibles (détaillées dans le tableau 4.2) utilisant les huit espèces suivantes : H_2 , O_2 , H_2O , H , O , OH , HO_2 et H_2O_2 .

Réactions		A^a	n	E^a
$H + O_2 \rightleftharpoons OH + O$		3.52e16	-0.7	71.42
$H_2 + O \rightleftharpoons OH + H$		5.06e4	2.67	26.32
$H_2 + OH \rightleftharpoons H_2O + H$		1.17e9	1.3	15.21
$H_2O + O \rightleftharpoons 2OH$		7.06e0	3.84	53.47
$2H + M \rightleftharpoons H_2 + M^b$		1.30e18	-1.0	0.0
$H + OH + M \rightleftharpoons H_2O + M^b$		4.00e22	-2.0	0.0
$2O + M \rightleftharpoons O_2 + M^b$		6.17e15	-0.5	0.0
$H + O + M \rightleftharpoons OH + M^b$		4.71e18	-1.0	0.0
$O + OH + M \rightleftharpoons HO_2 + M^b$		8.30e14	0.0	0.0
$H + O_2 + M \rightleftharpoons HO_2 + M^c$	k_0	5.75e19	-1.4	0.0
	k_∞	4.65e12	0.44	0.0
$HO_2 + H \rightleftharpoons 2OH$		7.08e13	0.0	1.23
$HO_2 + H \rightleftharpoons H_2 + O_2$		1.66e13	0.0	3.44
$HO_2 + H \rightleftharpoons H_2O + O$		3.10e13	0.0	7.20
$HO_2 + O \rightleftharpoons OH + O_2$		2.00e13	0.0	0.0
$HO_2 + H \rightleftharpoons H_2O + O_2$		2.89e13	0.0	-2.08
$2OH + M \rightleftharpoons H_2O_2 + M^d$	k_0	2.30e18	-0.9	-7.12
	k_∞	7.40e13	-0.37	0.0
$2HO_2 \rightleftharpoons H_2O_2 + H$		3.02e12	0.0	5.8
$H_2O_2 + H \rightleftharpoons HO_2 + H_2$		4.79e13	0.0	33.3
$H_2O_2 + H \rightleftharpoons HO_2 + OH$		1.00e13	0.0	15.0
$H_2O_2 + OH \rightleftharpoons HO_2 + H_2O$		7.08e12	0.0	6.0
$H_2O_2 + O \rightleftharpoons HO_2 + OH$		9.63e6	0.0	16.7

TABLE 4.2 - Coefficients des lois d'Arrhenius $k = AT^n \exp(-E/R^0T)$ pour le schéma vingt-et-une étapes de San Diego.^a unités : mol, s, cm³, kJ et K.^b Efficacités de Chaperon : 2,5 pour H₂, 16.0 pour H₂O et 1.0 pour les autres espèces ; paramètre de Troe pour la réaction de Falloff $F_c = 0.5$ [Gilbert et al., 1983].^c Efficacités de Chaperon : 2,5 pour H₂, 12.0 pour H₂O et 1.0 pour les autres espèces.^d Efficacités de Chaperon : 2,5 pour H₂, 6.0 pour H₂O et 1.0 pour les autres espèces ; $F_c = 0.265 \exp(-T/94K) + 0.735 \exp(-T/1756K) + \exp(-5182K/T)$.

4.2.3 Le schéma H2-12s (Boivin [Boivin, 2011])

Le schéma H2-12s est un schéma squelette basé sur le schéma de San Diego précédent. Il est composé de 12 étapes utilisant les même neuf espèces que le schéma de San Diego. Il a été obtenu en comparant la structure de flamme et le temps d'auto-allumage pour différents jeux de réactions élémentaires [Boivin, 2011]. Ce schéma a été conçu initialement pour la combustion du couple hydrogène-air. On se propose ici d'étudier son comportement en $H_2 - O_2$. Les réactions retenues pour ce schéma douze étapes sont données dans le tableau 4.3.

	Réactions		A^a	n	E^a
1	$H + O_2 \rightleftharpoons OH + O$	k_f	$3.52e16$	-0.7	71.42
		k_b	$7.04e13$	-0.26	0.60
2	$H_2 + O \rightleftharpoons OH + H$	k_f	$5.06e4$	2.67	26.32
		k_b	$3.03e4$	2.63	20.23
3	$H_2 + OH \rightleftharpoons H_2O + H$	k_f	$1.17e9$	1.3	15.21
		k_b	$1.28e10$	1.19	78.25
4	$H + O_2 + M \rightarrow HO_2 + M^b$	k_0	$5.75e19$	-1.4	0.0
		k_∞	$4.65e12$	0.44	0.0
5	$HO_2 + H \rightarrow 2OH$	k_f	$7.08e13$	0.0	1.23
6	$HO_2 + H \rightleftharpoons H_2 + O_2$	k_f	$1.66e13$	0.0	3.44
		k_b	$2.69e12$	0.36	213.86
7	$HO_2 + H \rightarrow H_2O + O_2$	k_f	$2.89e13$	0.0	-2.08
8	$H + OH + M \rightleftharpoons H_2O + M^c$	k_f	$4.00e22$	-2.0	0.0
		k_b	$1.03e23$	-1.75	496.14
9	$2H + M \rightleftharpoons H_2 + M^c$	k_0	$1.30e18$	-1.0	0.0
		k_∞	$3.04e17$	-0.65	433.09
10	$2HO_2 \rightarrow H_2O_2 + H$	k_f	$3.02e12$	0.0	5.8
11	$HO_2 + H_2 \rightarrow H_2O_2 + H$	k_f	$1.62e11$	0.61	100.14
12	$H_2O_2 + M \rightarrow 2OH + M^d$	k_0	$8.15e23$	-1.9	207.62
		k_∞	$2.62e19$	-1.39	214.74

TABLE 4.3 - Coefficients des lois d'Arrhenius $k = AT^n \exp(-E/R^0T)$ pour le schéma douze étapes.

^a unités : mol, s, cm³, kJ et K.

^b Efficacités de Chaperon : 2,5 pour H_2 , 16.0 pour H_2O et 1.0 pour les autres espèces ;
paramètre de Troe pour la réaction de Falloff $F_c = 0.5$.

^c Efficacités de Chaperon : 2,5 pour H_2 , 12.0 pour H_2O et 1.0 pour les autres espèces.

^d Efficacités de Chaperon : 2,5 pour H_2 , 6.0 pour H_2O et 1.0 pour les autres espèces ;
 $F_c = 0.265 \exp(-T/94K) + 0.735 \exp(-T/1756K) + \exp(-5182K/T)$.

4.2.4 Le schéma H2-3s (Boivin [Boivin, 2011])

Le schéma H2-12s a été un premier niveau de réduction du schéma de San Diego. Un second niveau a été d'utiliser l'approximation des états quasi-stationnaires (AEQS) pour obtenir le schéma présenté dans le tableau 4.4. Les détails de l'obtention de ce schéma H2-3s se trouvent dans la thèse de Boivin [Boivin, 2011], les étapes principales étant brièvement expliquées ici.

Dans un premier temps, on applique l'AEQS aux espèces O , OH , HO_2 et H_2O_2 ie. on considère que ces espèces ne varient que très peu au cours du temps, ce qui a pour effet de ne pas en tenir compte. Les taux de réaction pour les réactions I et II sont alors obtenus par les relations (4.1). Cependant, cette approximation s'est révélée trop forte pour l'auto-allumage à haute température, en particulier pour les mélanges pauvres. Une première correction a donc été effectuée en diminuant la contrainte sur l'espèce HO_2 pour créer la réaction III (Tab. 4.4). Son taux de réaction Q_{III} est calculé par la relation (4.1). Une deuxième correction a été apportée aux taux de réaction dans le cas de l'auto-allumage. Un critère vérifie la validité de l'AEQS pour l'espèce HO_2 en comparant son taux de production $\dot{C}_{HO_2,P}$ (Eq. (4.2)) et de consommation $\dot{C}_{HO_2,C}$ (Eq. (4.3)). Le coefficient Λ (Eq. (4.4)) est alors évalué et une correction est apportée aux trois taux de réaction lorsque le critère $\Lambda > 0.02$ est vérifié. Ces modifications ne changent pas les résultats obtenus pour les flammes prémélangées et non-prémélangées mais améliorent grandement les résultats en auto-allumage. Le schéma final comporte trois étapes (dont la dernière qui est principalement active dans des situations d'autoallumage) et utilise les 5 espèces suivantes : H_2 , H , O_2 , H_2O et HO_2 .

Réactions	
I	$3H_2 + O_2 \rightleftharpoons 2H_2O + 2H$
II	$H + H + M \rightleftharpoons H_2 + M$
III	$H_2 + O_2 \rightleftharpoons HO_2 + H$

TABLE 4.4 - Schémas trois étapes de Boivin

$$\begin{aligned}
 Q_I &= Q_1 + Q_{5f} + Q_{10f} + Q_{11f} \\
 Q_{II} &= Q_{4f} + Q_8 + Q_9 - Q_{10f} - Q_{11f} \\
 Q_{III} &= Q_{4f} - Q_{5f} - Q_6 - Q_{7f} - 2Q_{10f} - Q_{11f}
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

$$\dot{C}_{HO_2,P} = Q_{4f} + Q_{6b} \tag{4.2}$$

$$\dot{C}_{HO_2,C} = Q_{5f} + Q_{6f} + Q_{7f} + 2Q_{10f} + Q_{11f} \tag{4.3}$$

$$\Lambda = (\dot{C}_{HO_2,P} - \dot{C}_{HO_2,C}) / \dot{C}_{HO_2,P} \tag{4.4}$$

4.3 Définition et caractérisation des flammes laminares

On se propose de rappeler rapidement les définitions des caractéristiques de flammes dans deux modes de combustion : les flammes prémélangées et non-prémélangées. Afin d'introduire des concepts propres aux flammes de diffusion, on utilise les hypothèses suivantes :

- La pression statique est constante et le nombre de Mach est faible.
- Tous les coefficients de diffusion d'espèces sont égaux ($D_k = D$).
- Toutes les capacités calorifiques des espèces sont égales et indépendantes de la température ($C_{p_k} = C_p$).
- Tous les nombres de Lewis sont égaux et unitaires ($Le_k = 1$).

Les trois dernières hypothèses sont faites pour simplifier la démonstration mais ne sont pas nécessaires.

4.3.1 Rappels des propriétés des flammes laminares prémélangées

A partir d'une cinétique chimique à une réaction $\nu_F F + \nu_O O \rightarrow P$ avec un combustible F, un oxydant O, les produits P, et ν_O et ν_F les coefficients stœchiométriques correspondant au combustible et à l'oxydant, on peut définir le rapport de masse à la stœchiométrie :

$$s = \left(\frac{Y_O}{Y_F} \right)_{st} = \frac{\nu_O W_O}{\nu_F W_F} \quad (4.5)$$

avec Y_F et Y_O les fractions massiques respectivement du combustible et de l'oxydant. On définit à partir de la richesse Φ d'un mélange par :

$$\Phi = \left(\frac{Y_F}{Y_O} \right) / \left(\frac{Y_F}{Y_O} \right)_{st} = s \left(\frac{Y_O}{Y_F} \right) \quad (4.6)$$

Dans le cas où les réactifs sont injectés séparément dans la chambre de combustion, on définit une richesse globale d'injection Φ_g en fonction des fractions massiques de combustible Y_F^0 et d'oxydant Y_O^0 à leur injection respective :

$$\Phi_g = s \left(\frac{Y_F^0}{Y_O^0} \right) \quad (4.7)$$

Cette richesse du mélange conditionne les différentes caractéristiques de la flamme :

La vitesse de flamme laminaire prémélangée s_L^0 peut-être exprimée de manière analytique dans le cas d'une cinétique chimique à une étape (Zeldovich, Frank Kamenetski [Zeldovich and Frank-Kamenetskii, 1938], Echekki et Ferziger [Echekki and Ferziger, 1993], Van Kalmthout [van Kalmthout, 1996], Williams [Williams, 1985]), sous réserve de poser plusieurs hypothèses restrictives. Dans le cas d'une cinétique chimique plus complexe, on utilisera des codes de combustion comme

Cantera ou AVBP pour résoudre la flamme. A partir de la solution obtenue, il sera possible de déterminer la vitesse de flamme laminaire. Il suffit alors d'intégrer les équations suivantes (dans le référentiel de la flamme) :

$$\frac{d}{dx}(\rho u) = 0 \quad (4.8)$$

$$\rho_1 s_L^0 \frac{dY_F}{dx} = \frac{d}{dx} \left(\rho D \frac{dY_F}{dx} \right) + \dot{\omega}_F \quad (4.9)$$

$$\rho_1 C_p s_L^0 \frac{dT}{dx} = \frac{d}{dx} \left(\lambda \frac{dT}{dx} \right) - Q \dot{\omega}_F \quad (4.10)$$

$$(4.11)$$

avec Q la chaleur de réaction. Les termes diffusifs sont nuls des deux cotés et la vitesse d'entrée est égale à la vitesse de flamme laminaire. On obtient alors :

$$\rho u = \text{constant} = \rho_1 u_1 = \rho_2 u_2 \quad (4.12)$$

$$\rho_1 s_L^0 Y_F^1 = - \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\omega}_F dx = \omega_F \quad (4.13)$$

$$\rho_1 C_p s_L^0 (T_2 - T_1) = -Q \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\omega}_F dx = Q \omega_F \quad (4.14)$$

$$\text{ce qui donne } s_L^0 \propto \omega_F \quad (4.15)$$

L'épaisseur de flamme laminaire prémélangée peut être définie de manière analytique à partir de la vitesse de flamme laminaire s_L :

$$\delta_L = \frac{\lambda_1}{\rho_1 C_p s_L^0} = \frac{D_{th}^1}{s_L^0} \quad (4.16)$$

où $D_{th}^1 = \lambda_1 / (\rho_1 C_p)$, ρ_1 , C_p et λ_1 sont définis dans les gaz frais. Cette définition représente une *épaisseur de diffusion*. Elle reste cependant grossière pour définir une taille de maille adaptée pour une simulation. En pratique, on utilisera plutôt une définition basée sur les profils de température obtenus par un calcul de flamme :

$$\delta_L^0 = \frac{\Delta T}{|\nabla T|_{max}} \quad (4.17)$$

L'inconvénient de cette définition est qu'elle nécessite un calcul de flamme au préalable. Pour pallier à cette limite, on peut se référer à la corrélation de Blint [Blint, 1986] :

$$\delta_L^b = 2\delta \frac{(\lambda C_p)_2}{(\lambda C_p)_1} \quad (4.18)$$

En utilisant une loi de Sutherland pour λ (nombre de Prandtl (3.10) constant et C_p constant), la relation peut-être simplifiée par :

$$\delta_L^b = 2\delta \left(\frac{T_2}{T_1} \right)^{0,7} \quad (4.19)$$

On note qu'une épaisseur de réaction δ_r reste nécessaire pour résoudre correctement la cinétique chimique. Dans le cas d'une réaction à une étape, on peut estimer cette épaisseur par :

$$\delta_r = \delta_L^0 / \beta \quad (4.20)$$

où $\beta = (T_2 - T_1)T_a/T_2^2$ et T_a est la température d'activation dans la loi d'Arrhénus (3.18). A partir de ces deux caractéristiques de la flamme laminaire, il est possible de définir un **temps caractéristique de la cinétique chimique** τ_c comme le rapport de l'épaisseur de flamme laminaire sur la vitesse de flamme laminaire :

$$\tau_c = \frac{\delta_r}{s_L^0} \quad (4.21)$$

Le front de flamme peut aussi subir des effets étirement dus à un écoulement non-homogène. D'un point de vue local, **l'étirement** κ ("stretch" en anglais) est une variation de surface de flamme A créée par des effets de tension ("strain" en anglais) ou de courbure associés aux gradients de vitesse [Williams, 1985, Matalon and Matkowsky, 1982, Candel and Poinso, 1990].

$$\kappa = \frac{1}{A} \frac{dA}{dt} \quad (4.22)$$

$$= -\vec{n} \vec{n} : \nabla \vec{w} + \nabla \bullet \vec{w} \quad (4.23)$$

où \vec{w} est la vitesse du front de flamme et \vec{n} le vecteur normal au front de flamme. Cette expression peut être développée pour faire apparaître la composante de tension et la composante de courbure en décomposant $\vec{w} = \vec{u} + s_d \vec{n}$ avec \vec{u} la vitesse de l'écoulement et s_d la vitesse de déplacement de la flamme :

$$\begin{aligned} \kappa &= -\vec{n} \vec{n} : \nabla \vec{u} + \nabla \bullet \vec{u} + s_d (\nabla \vec{n}) \\ &= \underbrace{(\delta_{ij} - n_i n_j) \frac{\partial u_i}{\partial x_j}}_{tension} + \underbrace{s_d \frac{\partial n_i}{\partial x_i}}_{courbure} \end{aligned} \quad (4.24)$$

Dans une configuration de flamme à contre-courant stationnaire, l'étirement κ peut être ramené à la variation de vitesse globale divisée par la distance entre les deux entrées [Poinso and Veynante, 2005].

4.3.2 Rappels des propriétés des flammes laminaires non-prémélangées

4.3.2.1 Fraction de mélange Z

Dans le cas d'une cinétique à une réaction, et sous les hypothèses décrites précédemment, il est possible de combiner les équations de conservation du combustible et de l'oxydant pour obtenir

une équation sans terme source (4.27) vérifiée par la variable $Z = sY_F - Y_O$ où s est défini par Eq. (4.5). Z est donc un scalaire passif. Plusieurs définitions de Z peuvent être utilisées. On introduit souvent la normalisation suivante :

$$z = (Z - Z_O^0)/(Z_F^0 - Z_O^0) \quad (4.25)$$

$$= \frac{1}{\Phi_g + 1} \left(\Phi_g \frac{Y_F}{Y_F^0} - \frac{Y_O}{Y_O^0} + 1 \right) \quad (4.26)$$

où Z_O^0 et Z_F^0 sont respectivement les valeurs de Z dans les flux d'oxydant et de combustible. Pour le couple H_2/O_2 , la réaction (4.28) donne lieu au scalaire passif (4.29).

$$\partial_t(\rho Z) + \partial_x(\rho u Z) = \partial_x(\rho D \partial_x(Z)) \quad (4.27)$$



$$z_{H_2} = \frac{sY_{H_2} - Y_{O_2} + Y_{O_2}^0}{sY_{H_2}^0 + Y_{O_2}^0} = \frac{8 \times Y_{H_2} - Y_{O_2} + 1}{9} \text{ avec } Y_{H_2}^0 = Y_{O_2}^0 = 1 \quad (4.29)$$

$$z_{H_2,st} = \frac{Y_{O_2}^0}{sY_{H_2}^0 + Y_{O_2}^0} = \frac{1}{1 + \Phi_g} \quad (4.30)$$

La valeur stœchiométrique est $z_{H_2,st}$ (4.30). Pour une cinétique chimique à plusieurs étapes, il est plus judicieux d'utiliser une définition basée sur les atomes [Poinso et Veynante, 2005]. On définit alors le scalaire Z_j par la relation (4.31), avec a_{ij} le nombre d'atomes j dans la molécule de l'espèce i . Cette définition permet de donner une définition plus précise de la richesse avec la relation :

$$Z_j = \sum_{k=1}^N \left(\frac{a_{kj} W_j}{W_k} Y_k \right) \quad (4.31)$$

Dans le cadre du couple H_2/O_2 , l'élément de référence est l'atome d'hydrogène H. On adapte la relation (4.31) en fonction des espèces en présence, ce qui donne la relation (4.32) dans le cas du mécanisme H2-3s et la relation (4.33) pour le mécanisme H2-12s.

$$Z_H = W_H \left(2 \frac{Y_{H_2}}{W_{H_2}} + \frac{Y_H}{W_H} + 2 \frac{Y_{H_2O}}{W_{H_2O}} + \frac{Y_{HO_2}}{W_{HO_2}} \right) \quad (4.32)$$

$$Z_H = W_H \left(2 \frac{Y_{H_2}}{W_{H_2}} + \frac{Y_H}{W_H} + 2 \frac{Y_{H_2O}}{W_{H_2O}} + \frac{Y_{HO_2}}{W_{HO_2}} + \frac{Y_{OH}}{W_{OH}} + 2 \frac{Y_{H_2O_2}}{W_{H_2O_2}} \right) \quad (4.33)$$

Dans le cas particulier où $Y_{O_2}^0 = Y_{H_2}^0 = 1$, la fraction de mélange est donnée par la relation (4.34) et la valeur stœchiométrique est $z_{H_2,st} = 1/9$.

$$z_H = \frac{Z_H - Z_H(Y_{O_2}^0)}{Z_H(Y_{H_2}^0) - Z_H(Y_{O_2}^0)} = \frac{Z_H - 0}{2Y_{H_2}^0 W_H / W_{H_2} - 0} = Z_H \quad (4.34)$$

Sous l'hypothèse que les fractions massiques et la température ne dépendent que de la fraction de mélange et du temps (4.35), il est possible d'effectuer le changement de variable $(x, t) \rightarrow (z, t^*)$ dans Eq. (3.22) et Eq. (3.24) pour obtenir respectivement Eq. (4.36) pour les espèces et Eq. (4.37) pour la température.

$$Y_k = Y_k(z, t^*) \text{ et } T = T(z, t^*) \quad (4.35)$$

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t^*} = \dot{\omega}_k + \rho D \left(\frac{\partial z}{\partial x_i} \right)^2 \frac{\partial^2 Y_k}{\partial z^2} \quad (4.36)$$

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t^*} = \dot{\omega}_T + \rho D \left(\frac{\partial z}{\partial x_i} \right)^2 \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \quad (4.37)$$

Il est possible d'obtenir une solution analytique de z dans une configuration d'écoulement à contre-courant stationnaire ou instationnaire, de flamme libre ou de jet coaxial à écoulement uniforme (cf. Linan et Crespo [Linan and Crespo, 1976], Williams [Williams, 1985], ou Cuenot et Poinso [Cuenot and Poinso, 1996] pour les détails mathématiques). Cependant, tous ces cas permettent d'écrire :

$$\nabla z \propto \frac{1}{\sqrt{D}} \quad (4.38)$$

4.3.2.2 Taux de dissipation scalaire et temps caractéristiques

Les équations (4.36) et (4.37) introduisent la quantité $(\partial z / \partial x_i)^2$ qui est une fonction gaussienne en x , dans les cas canoniques. Dans la mesure où l'on se place dans des régimes de combustion rapide, le terme source des relations (4.36) et (4.37) n'est non nul que sur une très petite zone autour du point stœchiométrique. On considère alors $\left(\frac{\partial z}{\partial x_i} \right) \sim \left(\frac{\partial z}{\partial x_i} \right)_{st}$ dans Eq. (4.36) et ce terme apparaît comme un paramètre du système. On introduit le taux de dissipation scalaire χ_{st} défini par la relation (4.39) et homogène à l'inverse d'un temps¹ :

$$\chi_{st} = D \left| \nabla z \right|_{st}^2 \quad (4.39)$$

En remplaçant ∇z par la relation 4.38, on remarque que χ_{st} est indépendant de D . Dans le cas d'une flamme à contre-courant où l'étirement κ peut être ramené au gradient de vitesse a (cf. Eq. (4.58)), on peut montrer que χ_{st} est lié à l'étirement par la relation Eq. (4.40) [Poinso and Veynante, 2005] dépendant de la coordonnée x_1 de la position de front de flamme (avec $x_1 = 0$ au plan de stagnation). La fonction z étant monotone le long de l'axe x , une formulation simple en est déduite [Poinso and Veynante, 2005] :

$$\chi = \frac{a}{2\pi} \exp\left(-\frac{a}{D} x_1^2\right) \quad (4.40)$$

$$= \chi_0 F(z) \quad (4.41)$$

1. On préférera la notation de Cuenot et al. [Cuenot et al., 2000] pour qu'elle soit consistante avec le reste des relations classiques, contrairement à la définition $\chi_{st} = 2D \left| \nabla z \right|_{st}^2$.

En intégrant le taux de consommation du combustible, on obtient $\Omega_F = \int \dot{\omega}_F$ en fonction de χ_{st} [Poinsot and Veynante, 2005] :

$$\Omega_F = -\rho \frac{Y_F^0}{1 - z_{st}} \sqrt{D \chi_{st}} \quad (4.42)$$

La Figure 4.1 montre l'évolution du taux de consommation de combustible et de la température maximale en fonction de χ_{st} pour la cinétique H2-12s. La valeur maximale de χ_{st} est d'environ 10^4 s^{-1} . On trouve bien une dépendance $|\Omega_{H_2}| \propto \sqrt{\chi_{st}}$ qui rappelle les résultats de Ribert et al. [Ribert et al., 2008] et Pons et al. [Pons et al., 2008].

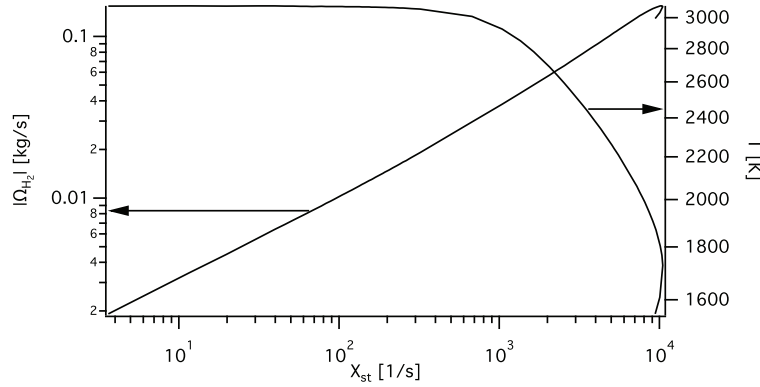


FIGURE 4.1 - Evolution de l'intégrale du taux de consommation d'hydrogène et de la température maximale en fonction de χ_{st} obtenue avec H2-12s.

La flamme de diffusion ne dépend que de la compétition entre le temps caractéristique de la chimie τ_c et le temps caractéristique de l'écoulement. Dans le cas laminaire, le temps caractéristique de l'écoulement, τ_{fl} (Eq. (4.43)), est choisi à partir du taux de dissipation scalaire $1/\chi_{st}$, équivalent à $1/a$ dans le cas d'une flamme stationnaire dans un écoulement à contre courant. On obtient alors le nombre de Damköhler Da^{fl} défini par la relation (4.44).

$$\tau_{fl} = 1/\chi_{st} \propto 1/a \quad (4.43)$$

$$Da = \tau_{fl}/\tau_c = \frac{1}{\chi_{st}\tau_c} \quad (4.44)$$

On trouvera dans [Poinsot and Veynante, 2005] (Eq. 3.90) une définition exacte de Da dans le cas d'une chimie à une réaction. Peters [Peters, 1991] fait un lien entre les notions de temps caractéristiques des flammes prémélangées et non-prémélangées de la manière suivante : dans le cas d'une flamme de prémélange, dans le repère de la flamme, le temps caractéristique de l'écoulement correspond au temps caractéristique de la flamme. Dans le repère de l'observateur, ces temps caractéristiques sont égaux lorsque la flamme est stationnaire. Le temps caractéristique de la flamme

τ_F est alors égal au temps chimique τ_c . Dans le cas d'une flamme de diffusion, la flamme existe tant que le temps caractéristique de l'écoulement τ_{fl} est plus grand que celui de la chimie τ_c ($Da \gg 1$). Plus τ_{fl} se rapproche de τ_c , moins la chimie a de temps pour consommer les réactifs et l'on se rapproche de l'extinction. On précise que cette analyse se place dans le cadre simplifié des hypothèses énoncées au paragraphe 4.3.2 pour une même température initiale, côté oxydant et combustible. De nombreuses analyses sur des conditions de Le différents ont été effectuées par Seshadri et Peters [Seshadri and Peters, 1988], Seshadri et al. [Seshadri et al., 1994], Cuenot et Poinot [Cuenot and Poinot, 1996], Seshadri [Seshadri, 1996] ou Pitsch et Peters [Pitsch and Peters, 1998]. Ces études montrent que loin de l'extinction, il est raisonnable d'utiliser une définition du taux de dissipation scalaire avec $Le = 1$.

4.3.2.3 Epaisseur de flamme laminaire

Contrairement à la flamme de prémélange, la flamme de diffusion n'a pas d'épaisseur caractéristique bien définie et il existe plusieurs définitions dans la littérature [Bilger, 1988, Bray and Peters, 1994, Lee, 1994, Cook and Riley, 1996]. **L'épaisseur de diffusion** l_D dans l'espace physique est donnée par :

$$l_D \approx \sqrt{\frac{D_{st}}{\chi_{st}}} = \frac{1}{|\nabla z|_{st}} \quad (4.45)$$

C'est une définition classique de l'épaisseur de la flamme de diffusion. On constate qu'elle dépend de l'écoulement : les flammes de diffusion n'ont pas d'épaisseur intrinsèque, mais une épaisseur imposée par le flux convectif-diffusif de l'écoulement. Avec la relation (4.38), on obtient :

$$l_D \propto \sqrt{D} \quad (4.46)$$

On définit aussi **l'épaisseur de réaction** l_R . La théorie asymptotique de Liñan [Linan, 1974] donne :

$$l_R/l_D \propto (Da)^{-1/\nu_t} \quad (4.47)$$

$$\text{avec } \nu_t = \nu_F + \nu_O + 1 \quad (4.48)$$

où ν_F et ν_O sont les coefficients stœchiométriques du combustible et de l'oxydant (cf section 4.3.1). Cette expression permet d'écrire :

$$l_R \propto l_D \times (Da)^{-1/\nu_t} = \frac{1}{|\nabla z|_{st}} \times \left(\frac{\tau_{fl}}{\tau_c} \right)^{-1/\nu_t} \propto \sqrt{D_{st}} \times (\chi_{st}\tau_c)^{1/\nu_t} \quad (4.49)$$

Si $l_{R,ext}$ est l'épaisseur réactive à l'extinction, on peut donc montrer que

$$\frac{l_R}{l_{R,ext}} = \left(\frac{\chi_{st}}{\chi_{ext}} \right)^{1/\nu_t} \quad (4.50)$$

4.4 Caractérisation de la combustion

On compare ici les quatre cinétiques décrites précédemment, en termes de température adiabatique de flamme, de vitesse de flamme laminaire, et de temps d'auto-allumage. Le tableau 4.5 rappelle les conditions d'utilisation. Notamment, on ne pourra comparer AVBP et CANTERA que pour les schémas H2-12s et H2O2-GL7-1. A noter que pour ces schémas, une comparaison de validation peut être faite en utilisant le transport simplifié d'AVBP dans CANTERA.

Cinétique chimique	AVBP	Cantera	Cantera avec transport AVBP
San Diego		X	
H2-12s	X	X	X
H2-3s	X		
H2O2-GL7-1	X	X	X

TABLE 4.5 - Implantation et tests des cinétiques chimiques dans AVBP et CANTERA.

4.4.1 Températures d'équilibre

On commence par comparer les températures d'équilibre. Pour cela, des calculs de réacteurs homogènes 0D sont effectués avec le logiciel Cantera [Goodwin,]. Ces températures ne dépendent que des espèces considérées dans le mélange, et permettent de vérifier que la liste réduite des espèces utilisées pour les schémas simplifiés reste suffisante d'un point de vue thermodynamique. Ces calculs sont effectués pour une gamme de richesse de $\phi = 0,1$ à $\phi = 11$ et pour les pressions suivantes : 0,1bar (Fig. 4.2(a)), 1bar (Fig. 4.2(b)) et 10bar (Fig. 4.2(c)). Le schéma H2-12s donne des résultats identiques au schéma de San Diego. Le schéma H2-3s présente une différence de température pour les mélanges pauvres, due à l'absence des espèces H , OH et H_2O_2 . Bien que le schéma H2O2-GL7-1 n'utilise pas les espèces HO_2 et H_2O_2 , les résultats sont très proches de ceux du schéma San Diego. Il semble donc que ces espèces ne jouent pas un rôle important pour la température d'équilibre à l'inverse de H et OH qui sont nécessaires en pauvre. L'erreur du schéma H2-3s est de 200K maximum, ce qui est non négligeable. Cependant, on notera que les flammes prémélangées rencontrées dans les calculs moteurs des chapitres suivants sont à des richesses supérieures à la stœchiométrie.

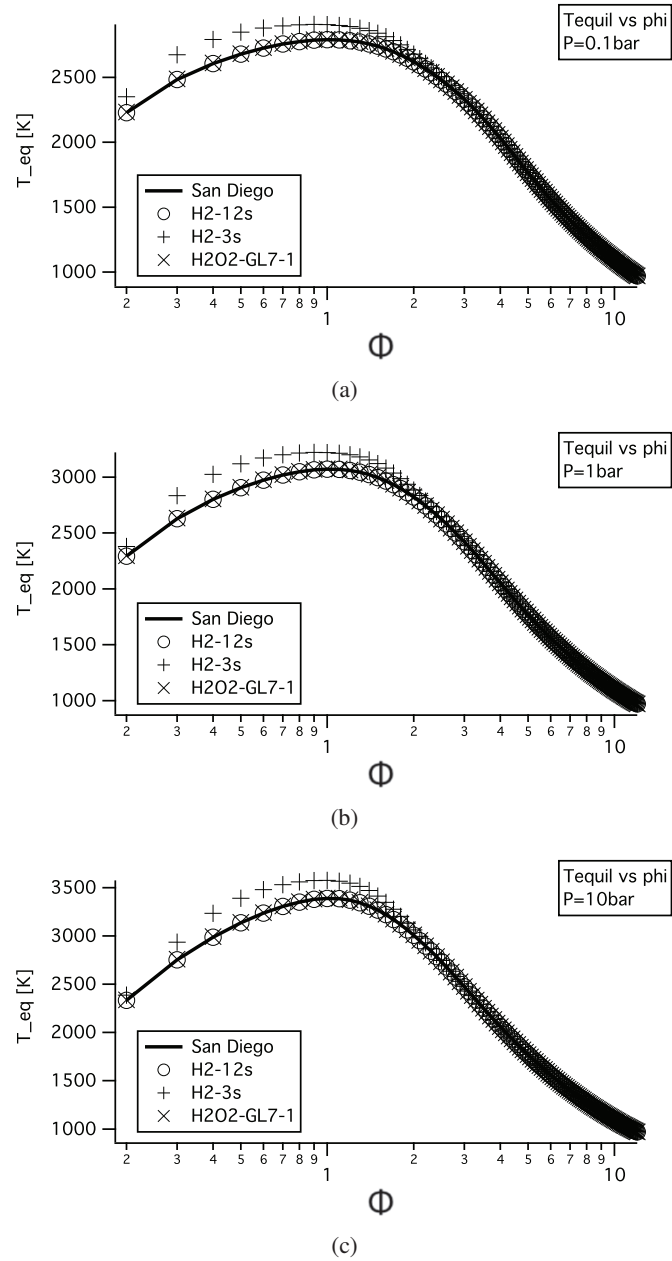
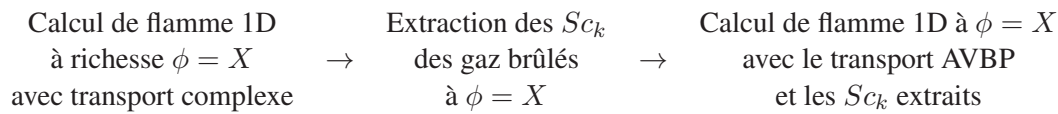


FIGURE 4.2 - Température d'équilibre pour les différents schémas, en fonction de la richesse à $P=0,1$ bar (a), $P=1$ bar (b) et $P=10$ bar (c)

4.4.2 Flammes prémélangées 1D

4.4.2.1 Modèle de transport simplifié pour la chimie H2-O2

Le modèle de transport du code AVBP a été défini à la section 3.3. Il introduit un nombre de Le_k constant pour chaque espèce. La diffusion moléculaire jouant un rôle essentiel dans la structure de flamme, la valeur de Le_k donnant une bonne structure de flamme pour une chimie réduite n'est à priori pas connue. On se propose de trouver le meilleur jeu de coefficients de diffusion D_k pour les espèces du schéma cinétique H2-12s, ainsi que la loi de viscosité la plus adaptée (Sutherland (Eq. 3.12) ou puissance (Eq. 3.13)) et le meilleur coefficient de conduction thermique λ (Eq. 3.5). Dans ce but, on compare les résultats du schéma H2-12s original (nommé "Cantera complexe") aux résultats obtenus avec différents jeux de propriétés de transport. Les différents jeux de nombres de Schmidt (Tab. 4.6), de loi de viscosité et de nombre de Prandtl (Tab. 4.7) sont issus des références de Boivin et Lacaze et des calculs CANTERA. La référence "Boivin" correspond aux paramètres utilisés dans le calcul de la flamme de Cheng [Boivin et al., 2012] qui est une flamme de diffusion H2-Air. Les jeux de paramètres "Cantera phi=X" sont obtenus à partir des gaz brûlés de flammes prémélangées H2-O2, respectivement à richesses 1, 1.4, 2 et 4, calculées avec le schéma H2-12s en utilisant le transport complexe de CANTERA.



L'ensemble des jeux de nombre de Schmidt extraits est répertorié dans le tableau 4.6. On constate une faible variation des valeurs du nombre de Schmidt pour l'ensemble des espèces (entre 0,08 et 0,11) à l'exception de l'espèce H_2O qui montre une variation dont le nombre de Schmidt varie de 1,04. Les Figures 4.3, 4.4 et 4.5 comparent les vitesses de flammes obtenues avec le schéma H2-12s utilisant les différents jeux de paramètres de transport simplifié au schéma San Diego, pour trois pressions : 0,1 bar, 1 bar et 10 bar. Les résultats montrent que les jeux de paramètres "Cantera phi=X" donnent la même solution que le transport complexe à la richesse dont ils sont issus, le meilleur résultat de cette série de paramètres étant obtenu avec "Cantera phi=1.4". Cependant, le jeu de paramètres "Boivin" donne la solution la plus proche du transport complexe. On conservera donc ce jeu de paramètres pour la suite de l'étude (éléments grisés de la Table 4.6 et de la Table 4.7).

4.4.2.2 Comparaison des vitesses de flammes laminares

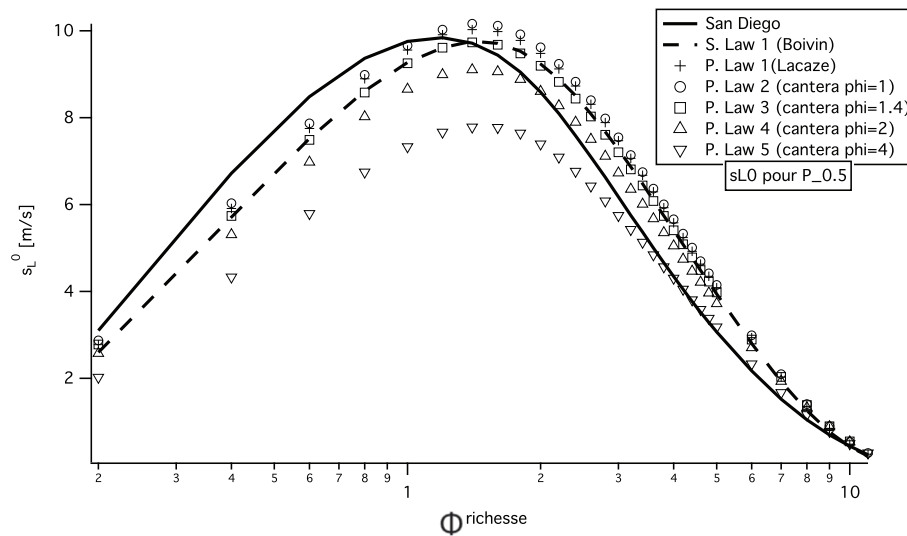
On calcule maintenant des flammes prémélangées 1D avec les quatre schémas et les modèles de transport associés : les schémas H2-3s et H2-12s utilisent les paramètres sélectionnés dans la

Référence	H2	H	O2	OH	O	H2O	HO2	H
Boivin [Boivin et al., 2012] et Lacaze [Lacaze, 2009]	0.28	0.17	0.99	0.65	0.64	0.77	0.65	0
Cantera phi=1	0.29	0.18	1.02	0.67	0.65	0.8	0.99	1
Cantera phi=1.4	0.29	0.20	1.03	0.70	0.68	1.17	1.02	1
Cantera phi=2	0.27	0.23	1.04	0.72	0.70	1.83	1.03	1
Cantera phi=4	0.21	0.29	1.07	0.76	0.75	1.84	1.07	1

TABLE 4.6 - Nombres de Schmidt.

Référence	loi de viscosité	μ_0	c_2	Pr
Boivin [Boivin et al., 2012]	Sutherland	$1.788e - 5$	110.4	0.75
Lacaze [Lacaze, 2009]	Puissance	$1.79e - 5$	0.686	0.64
Cantera phi=1	Puissance	$1.82e - 5$	0.723	0.62
Cantera phi=1.4	Puissance	$1.73e - 5$	0.722	0.59
Cantera phi=2	Puissance	$1.61e - 5$	0.718	0.58
Cantera phi=4	Puissance	$1.39e - 5$	0.694	0.58

TABLE 4.7 - Coefficients des lois de viscosité et nombres de Prandtl.

FIGURE 4.3 - Vitesses de flamme dans des mélanges H_2/O_2 à 0.5bar pour différents paramètres de transport, avec le schéma H2-12s.

section précédente, le schéma de San Diego utilise le transport complexe, et le schéma H2O2-GL7-1 utilise les paramètres intitulés "Lacaze" de la section précédente. Ces quatre schémas sont comparés pour 3 valeurs de pression : $P = 0, 1\text{bar}$ (Fig. 4.6), $P = 1\text{bar}$ (Fig. 4.7) et $P = 4\text{bar}$ (Fig.

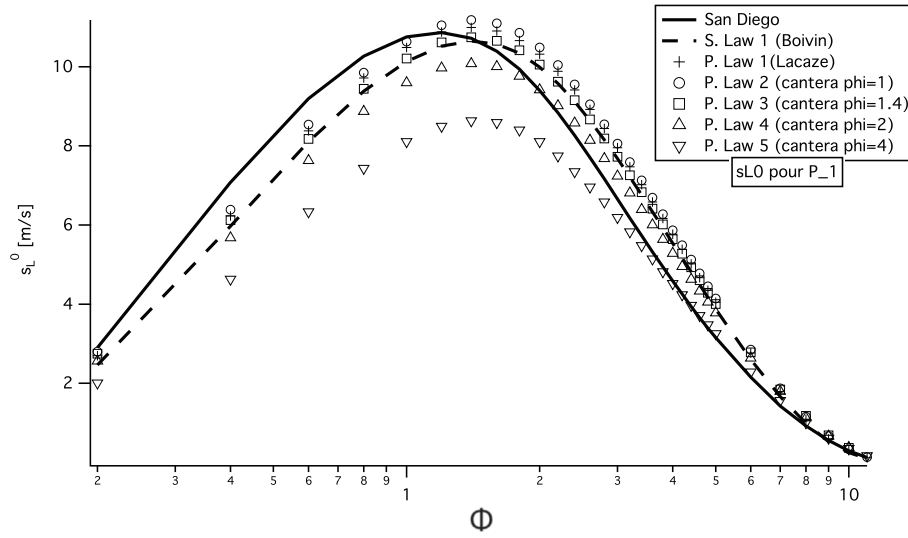


FIGURE 4.4 - Vitesses de flamme dans des mélanges H_2/O_2 à 1bar pour différents paramètres de transport, avec le schéma H2-12s.

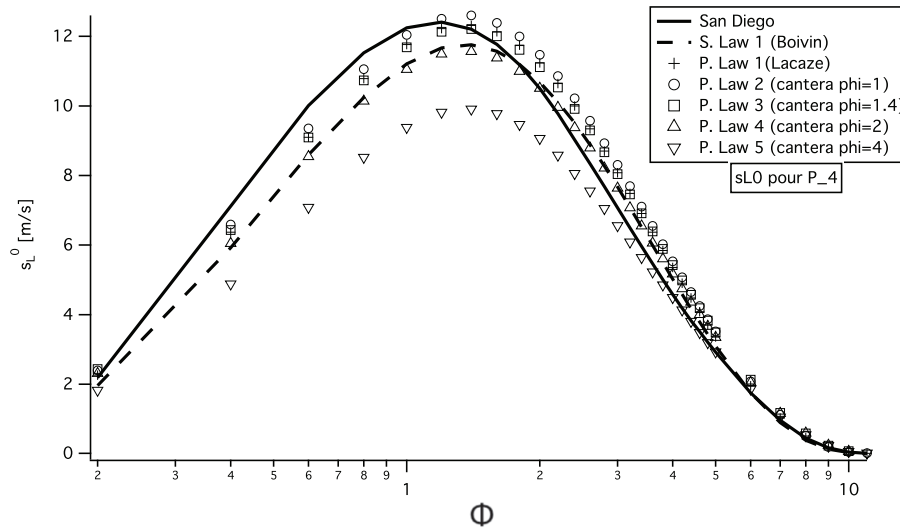


FIGURE 4.5 - Vitesses de flamme dans des mélanges H_2/O_2 à 4bar pour différents paramètres de transport, avec le schéma H2-12s.

4.8). Le schéma H2-3s donne de bons résultats pour les trois pressions, très proches du schéma H2-12s. On constate que le schéma H2O2-GL7-1 donne de manière générale de moins bons résultats,

surtout aux basses pressions.

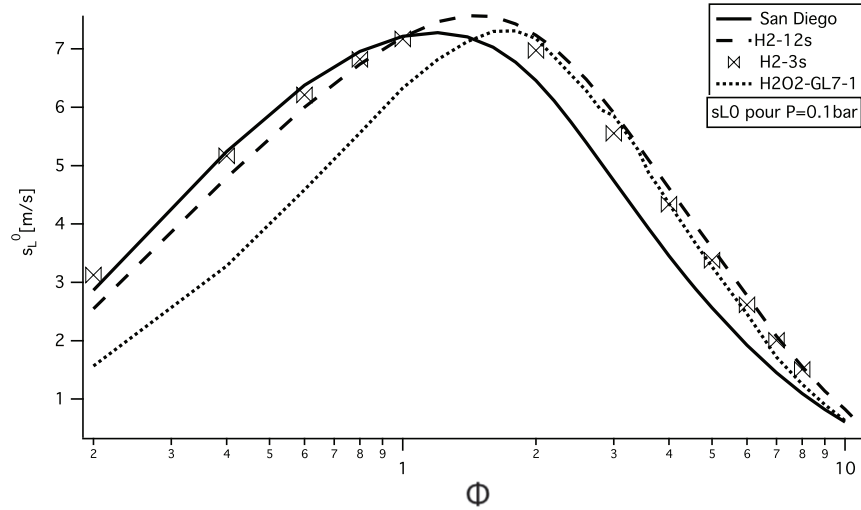


FIGURE 4.6 - Vitesses de flammes prémélangées H_2/O_2 à 0,1 bar avec les schémas San Diego, H2-12s, H2-3s et H2O2-GL7.

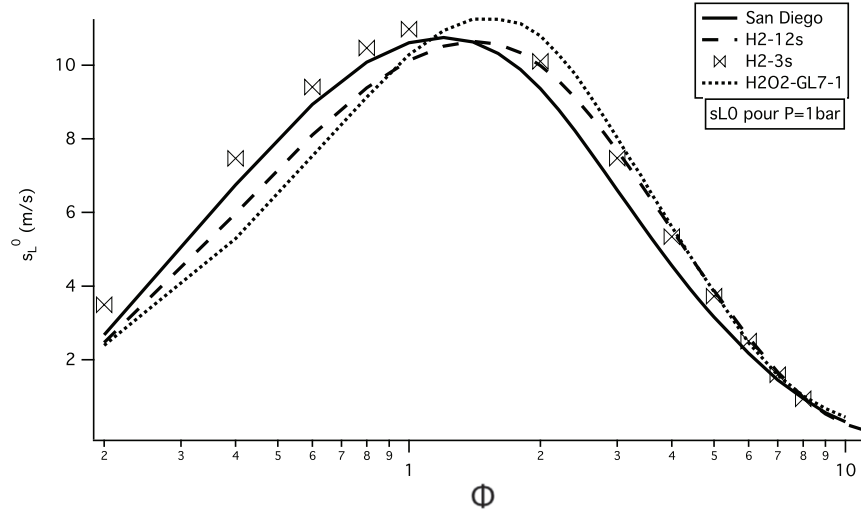


FIGURE 4.7 - Vitesses de flammes prémélangées H_2/O_2 à 1 bar avec les schémas San Diego, H2-12s, H2-3s et H2O2-GL7.

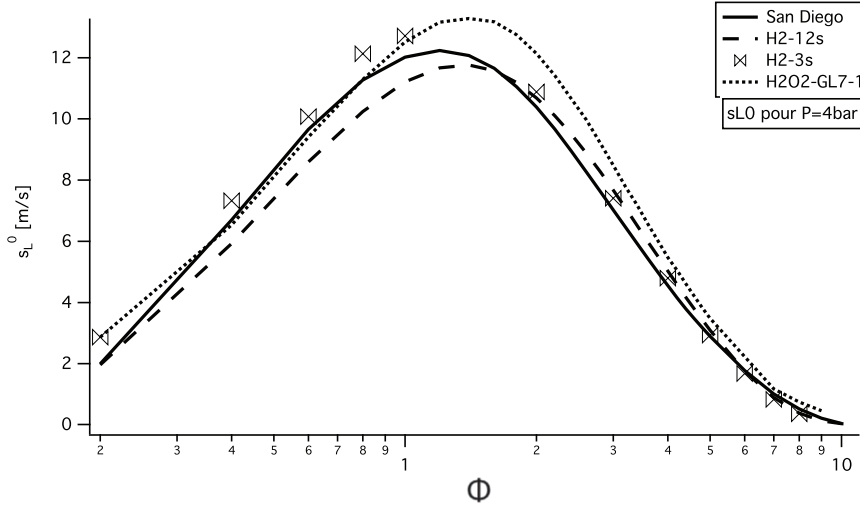


FIGURE 4.8 - Vitesses de flammes prémélangées H_2/O_2 à 4bar avec les schémas San Diego, H2-12s, H2-3s et H2O2-GL7.

4.4.3 Auto-allumage

Pour caractériser le temps d'auto-allumage d'une cinétique, on étudie l'évolution temporelle 0D de la température d'un mélange. Le temps d'auto-allumage t_{ignit} est défini par le critère d'inflexion de la courbe de température, ie. le temps auquel la dérivée de la température est maximale [Williams, 2008]². Le délai d'auto-allumage varie selon que le système évolue à volume constant ou à pression constante. Dans un moteur fusée, la chambre de combustion n'est pas fermée comme dans un moteur à piston, mais les parois créent un confinement qui implique une variation de pression lors de l'allumage.

4.4.3.1 Volume constant

Le calcul AVBP réalisé pour caractériser la chimie H2-3s utilise un domaine carré avec des conditions limites périodiques. Les autres calculs sont réalisés avec CANTERA en 0D. On constate que les schémas réduits H2-3s et H2-12s donnent des résultats quasi identiques au schéma de référence San Diego, ce qui n'est pas le cas du schéma H2O2-GL7-1. Ce dernier présente un ordre de grandeur d'avance dans une configuration à température initiale $T_{init} = 1000K$ quelque soit la richesse (Fig. 4.9), et un écart qui tend à se réduire lorsque l'on augmente la T_{init} (Fig. 4.10).

2. La complexité de calcul des termes sources dans la cas H2-3s ne permet pas d'utiliser une définition plus usuelle, basée sur les constantes pré-exponentielles et les énergies d'activation des chaque réactions.

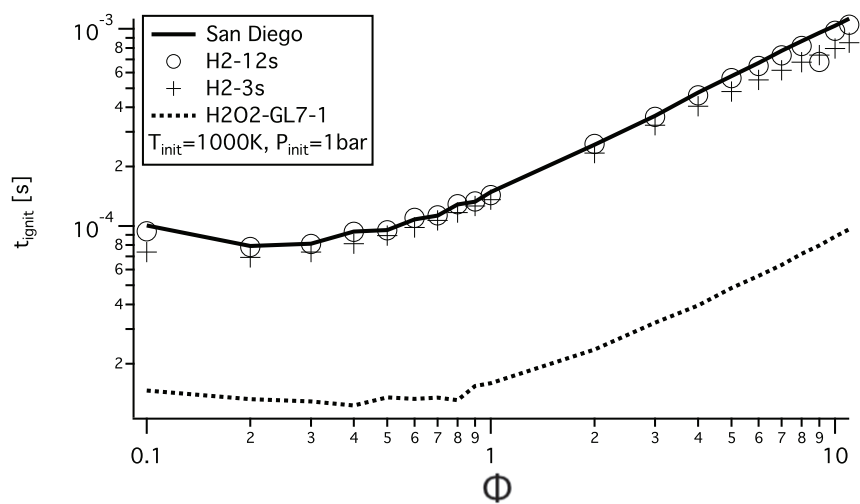


FIGURE 4.9 - Évolution du temps d'auto-allumage d'un mélange H_2/O_2 à $T_{\text{init}} = 1000\text{K}$ et $P_{\text{init}} = 1\text{bar}$ en fonction de la richesse, à volume constant.

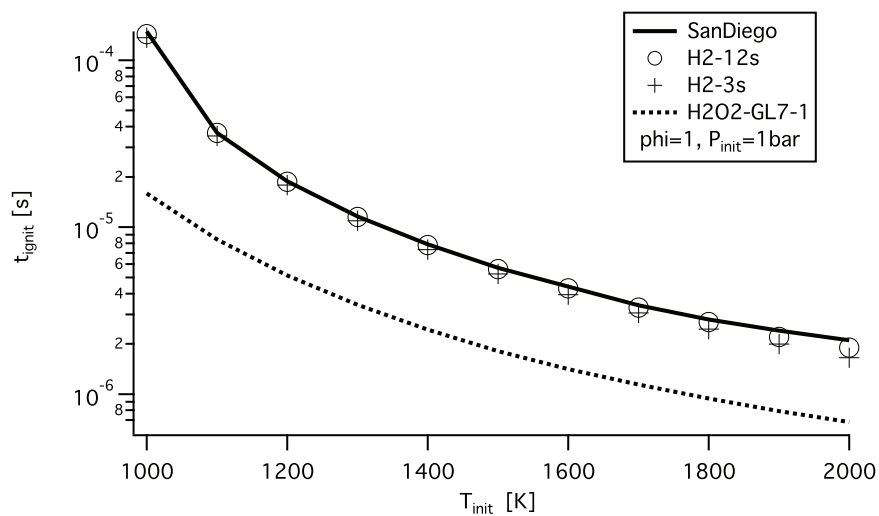


FIGURE 4.10 - Évolution du temps d'auto-allumage d'un mélange H_2/O_2 à $\phi = 1$ et $P_{\text{init}} = 1\text{bar}$ en fonction de la température initiale, à volume constant.

4.4.3.2 Pression constante

La figure 4.11 montre l'évolution du temps d'auto-allumage à pression constante pour les schémas San Diego, H2-12s et H2O2-GL7-1 pour un mélange H_2/O_2 . Encore une fois, le schéma H2O2-GL7-1 donne un temps d'auto-allumage d'un ordre de grandeur plus petit, alors que le schéma H2-12s donne exactement le bon délai. Le calcul 0D à pression constante ne pouvant être effectué avec AVBP, la cinétique H2-3s n'a pu être testée. Cependant, Boivin [Boivin et al., 2011] a comparé l'évolution du temps d'auto-allumage d'un mélange H_2/air pour les schémas San Diego, H2-12s et H2-3s, et représenté sur la Figure 4.12. On constate que le schéma H2-3s donne d'excellents résultats grâce à sa correction sur l'AEQS [Boivin, 2011]. Le schéma H2-3s ayant des caractéristiques très proches de celles du schéma H2-12s, on peut supposer que son comportement dans le cas d'un mélange H_2/O_2 sera aussi bon que H2-12s.

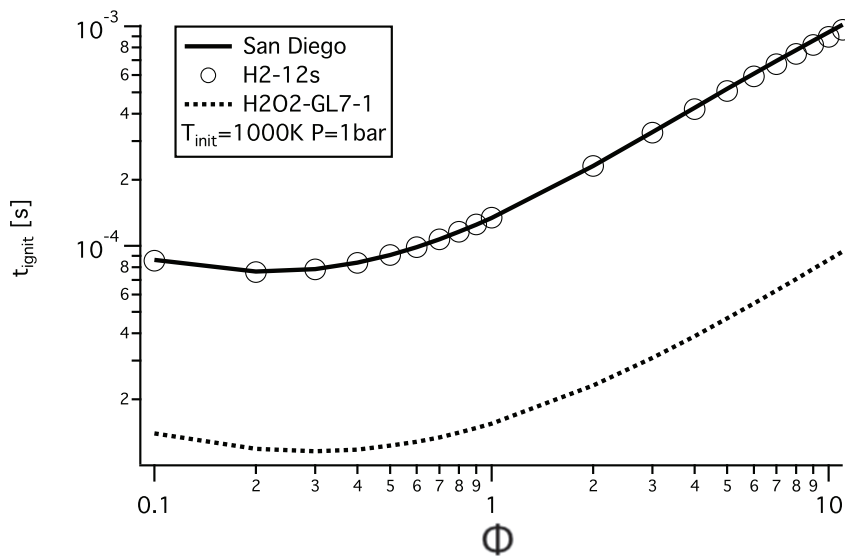


FIGURE 4.11 - Évolution du temps d'auto-allumage d'un mélange H_2/O_2 à $T_{init} = 1000K$ et $P = 1bar$ en fonction de la richesse, à pression constante.

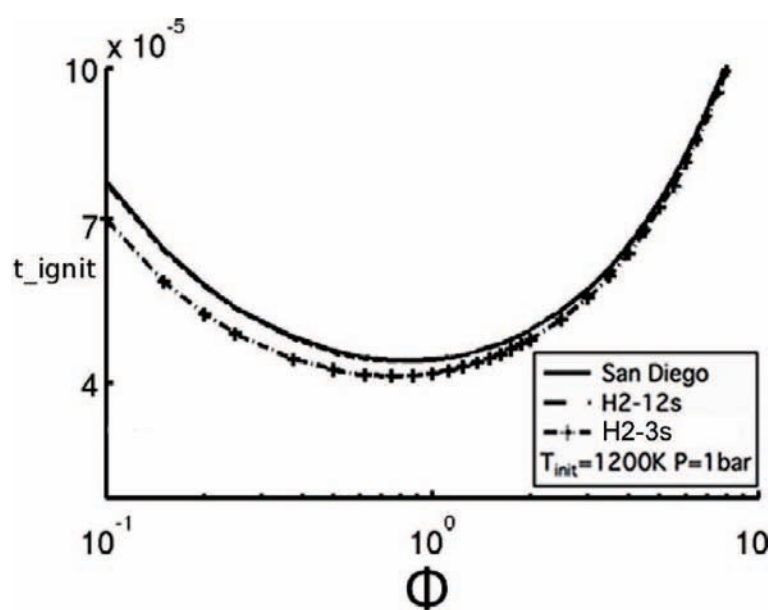


FIGURE 4.12 - Évolution du temps d'auto-allumage d'un mélange H_2/Air à $T_{\text{init}} = 1200K$ et $P = 1bar$ en fonction de la richesse, à pression constante [Boivin et al., 2011].

4.4.4 Structures de flammes

On compare ici des calculs de flammes prémélangées à 1bar et à $\phi = 1$. Les figures 4.13 et 4.14 montrent les profils de ρ , T , ω_T , et des fractions massiques de H_2 , H , O_2 , H_2O , HO_2 . Le schéma H2-12s est très proche de la référence San Diego. Le schéma H2O2-GL7-1 ne reproduit pas la bonne forme du profil de dégagement de chaleur bien que la température d'équilibre reste correcte. À l'inverse, le schéma H2-3s a la bonne forme de profil mais surestime la température finale (cf Sec. 4.4.1). On constate aussi une forte différence au niveau de la composition finale due au nombre réduit d'espèces.

Epaisseur de flamme

Contrairement à la température de fin de combustion ou la vitesse de flamme, l'épaisseur de flamme calculée comme dans l'Eq. (4.51) introduit une contrainte numérique, car elle impose la taille de maille nécessaire pour résoudre le gradient de température. La figure 4.15 présente l'évolution de cette épaisseur en fonction de la richesse du mélange pour différentes pressions (0,1bar, 1bar, 4bar) et pour les différents schémas cinétiques. Globalement, tous les schémas reproduisent le bon ordre de grandeur et la bonne tendance en richesse et pression. Les schémas cinétiques H2-3s et H2-12s sont proches et en bon accord avec la référence San Diego. L'épaisseur de flamme prédite par le schéma H2O2-GL7-1 est globalement moins bonne en particulier pour les richesses inférieures à deux.

$$\delta_L^0 = \frac{\Delta T}{|\nabla T|_{max}} \quad (4.51)$$

Dépendance en pression

Lors d'un allumage, la pression dans la chambre peut varier fortement, avec un fort impact sur la cinétique chimique. Agnew et Graiff [Agnew and Graiff, 1961] font partie des premiers auteurs à avoir étudié la dépendance en pression de la vitesse de flamme laminaire dans un mélange à la stœchiométrie. Pour plusieurs couples combustible/oxydant, ils ont observé le comportement suivant, l'exposant 0 correspondant à un état de référence :

$$\frac{s_L^0(P)}{s_L^0(P^0)} = \alpha_P \ln \left(\frac{P}{P^0} \right) \quad (4.52)$$

Pour le mélange H_2/O_2 dans une gamme de pression de 0,5 à 5 bar, Agnew et Graiff [Agnew and Graiff, 1961] proposent :

$$P^0 = 1 \text{ bar}, s_L(P^0) = 1150 \text{ cm/s}, \alpha_P = 98 \quad (4.53)$$

Une étude analytique reportée dans Poinso et Veynante [Poinso and Veynante, 2005] propose une autre relation de dépendance de la vitesse de flamme en fonction de la pression que l'on conservera pour la suite :

$$\frac{s_L^0(P)}{s_L^0(P^0)} \propto \left(\frac{P}{P^0} \right)^{\alpha_P} \quad (4.54)$$

Dans le cas d'une cinétique simplifiée à une étape, l'épaisseur et la vitesse de flamme sont liées par $\delta_L \propto D_{th}/s_L$ avec $D_{th} = \lambda/\rho C_p \propto 1/P$ [Poinso and Veynante, 2005]. On obtient donc une relation de dépendance simple de l'épaisseur de flamme en fonction de la pression :

$$\frac{\delta_L^0(P)}{\delta_L^0(P^0)} \propto \left(\frac{P}{P^0} \right)^{-(1+\alpha_P)} \quad (4.55)$$

Le schéma H2-12s est utilisé avec CANTERA pour calculer les épaisseurs de flamme pour différentes pressions. La relation 4.55 permet d'obtenir une estimation de l'épaisseur de flamme en fonction de la pression (Eq. (4.56)) en se basant sur les valeurs à $P = 0,1 \text{ bar}$ et $P = 20 \text{ bar}$. La figure 4.16 compare les épaisseurs de flamme obtenues avec Cantera à la fonction $\delta_{L,app}(P)$. La loi puissance est une bonne approximation de l'évolution de l'épaisseur en fonction de la pression³.

$$\delta_{L,app}^0(P) = \delta_L^0(P_0) \times \left(\frac{P}{P_0} \right)^{-1,219} \quad (4.56)$$

avec $P_0 = 0,1 \text{ bar}$ et $\delta_L^0(P_0) = 3,14 \cdot 10^{-3} \text{ m}$

A partir de ces relations, il est possible d'obtenir une dépendance en pression du temps caractéristique de la chimie τ_c à partir des Eq. (4.21), Eq (4.54) et Eq.(4.55) :

$$\frac{\tau_c}{\tau_c(P^0)} \propto \left(\frac{P}{P^0} \right)^{\beta} \quad (4.57)$$

avec $\beta = -2(1 + \alpha_P) + 1$

Dans cette relation, l'utilisation de Eq. (4.56), avec $P^0 = 0,1 \text{ bar}$, donne une valeur $\beta = -1.437$. En pratique, les calculs avec CANTERA (Fig.4.17) donnent la valeur légèrement différente $\beta = -1.2926$.

3. Les tables NIST-JANAF [NIST, 1998] définissent l'hydrogène à 300K comme supercritique à partir de 13bar.

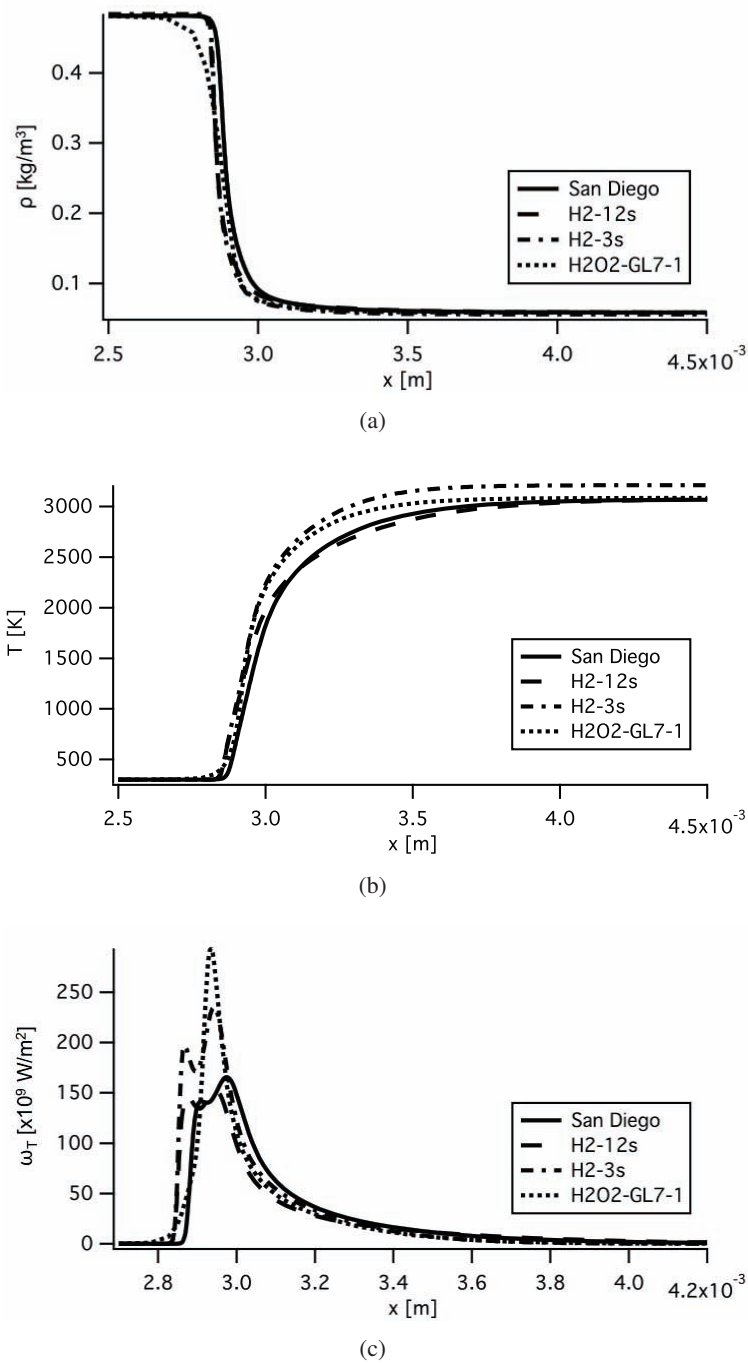


FIGURE 4.13 - Profils de masse volumique (a), température (b) et taux de dégagement de chaleur (c) au travers d'une flamme prémélangée à $\phi = 1$ et $P = 1$ bar pour les quatre différents schémas cinétiques.

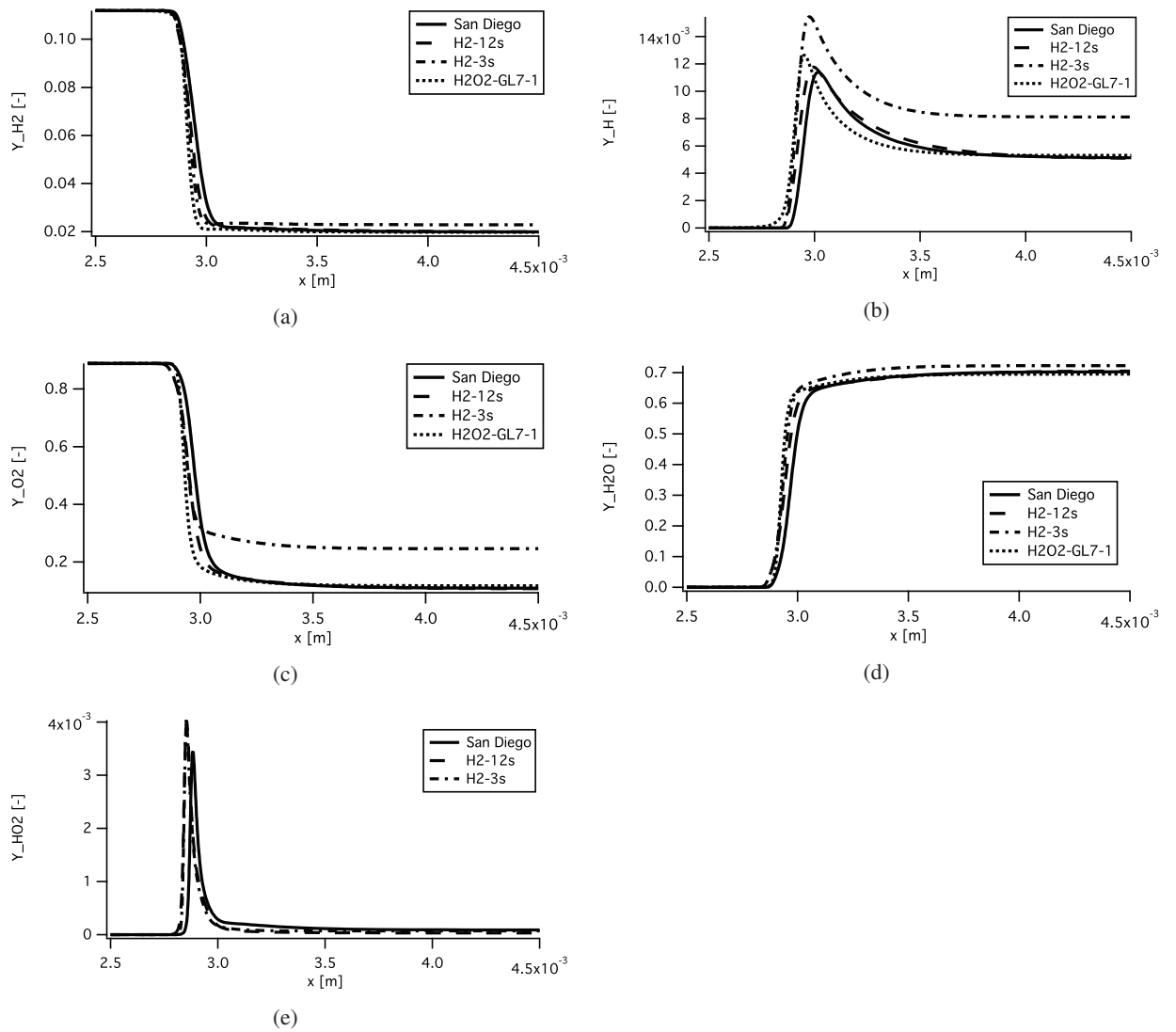


FIGURE 4.14 - Profils des fractions massiques des espèces $H_2(a)$, $H(b)$, $O_2(c)$, $H_2O(d)$ et $HO_2(e)$ au travers d'une flamme prémélangée à $\phi = 1$ et $P = 1\text{bar}$ pour les quatre différents schémas cinétiques.

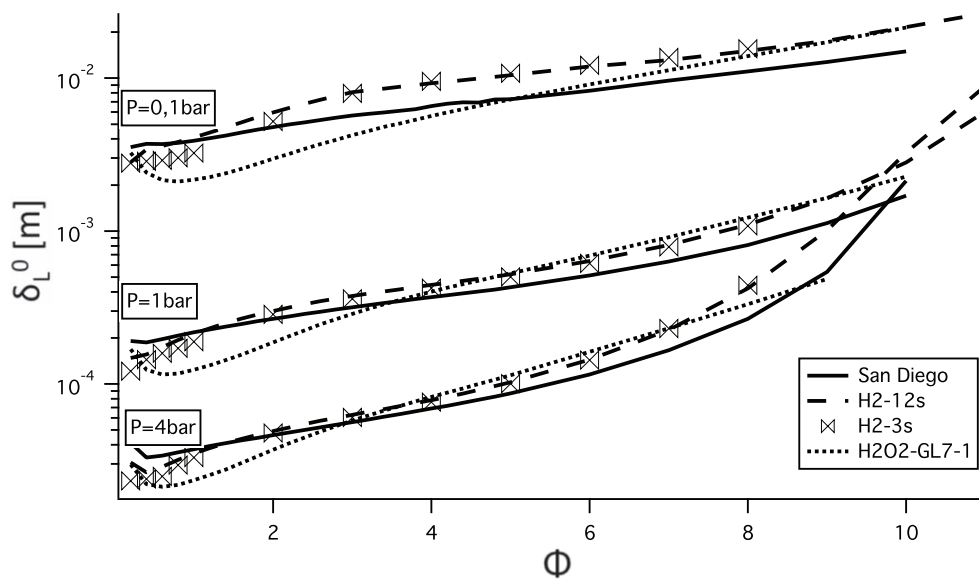


FIGURE 4.15 - Evolution de l'épaisseur de flamme prémélangée H₂/O₂ en fonction de la richesse à différentes pressions, pour les quatre différents schémas cinétiques.

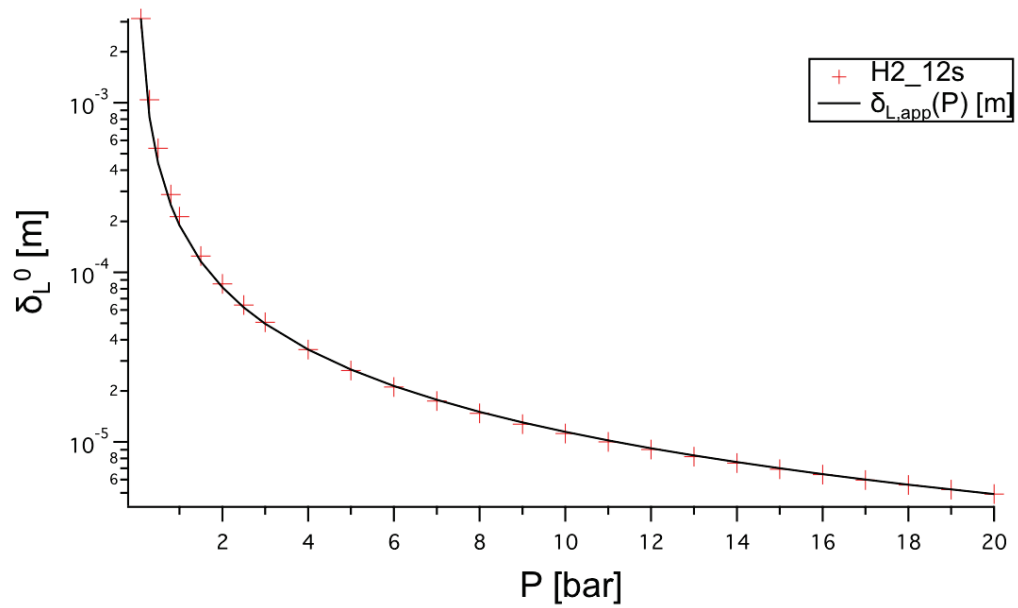


FIGURE 4.16 - Epaisseur de flamme de prémélange laminaire à la stœchiométrie en fonction de la pression obtenue avec H2-12s (CANTERA) et son interpolation définie par $\delta_{L,app}^0(P)$ (Eq. (4.56)).

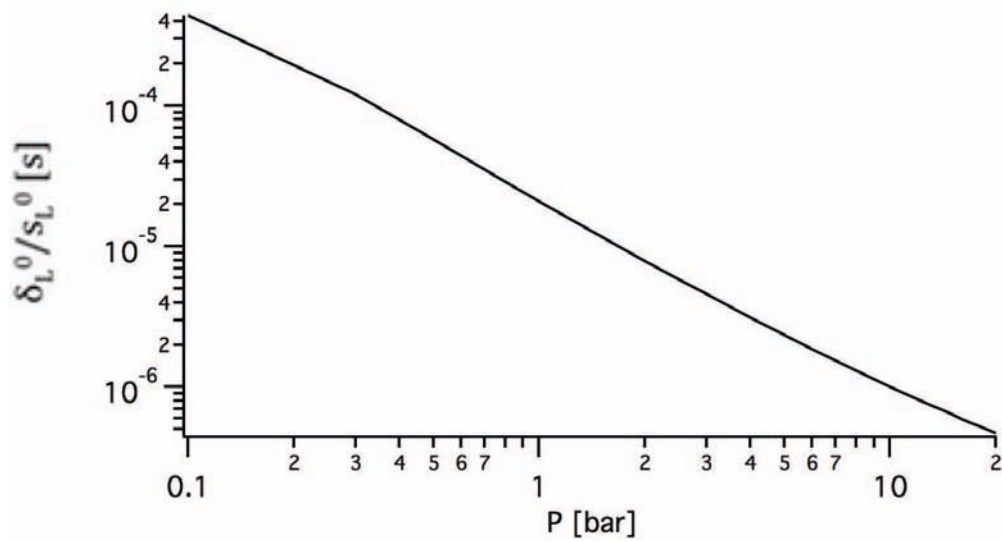


FIGURE 4.17 - Evolution de $\tau_c = \delta_L^0 / s_L^0$ en fonction de la pression à partir de flammes prémélangées laminares à la stœchiométrie en fonction de la pression, obtenue avec H2-12s.

4.4.5 Flamme non-prémélangée

Pour étudier la structure des flammes non-prémélangées, on utilise une configuration de flamme étirée dans un écoulement à contre-courant.

4.4.5.1 Configuration à contre-courant

Un jet d'hydrogène est opposé à un jet d'oxygène (Fig.4.18). On suppose que la flamme est un élément mince au sein d'un écoulement potentiel. Ceci permet de définir les conditions d'injection comme pour une configuration inerte. Dans cette configuration, la définition de l'étirement κ (Eq.

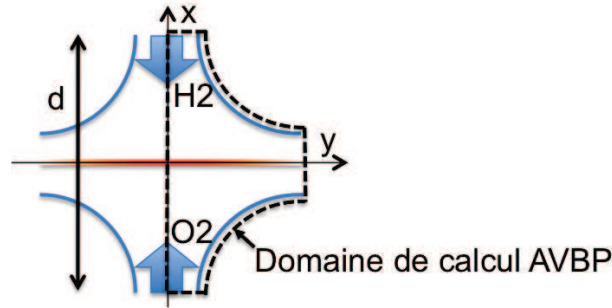


FIGURE 4.18 - Représentation schématique de la configuration à contre courant.

4.22) peut être ramenée au gradient global de vitesse noté a (Eq. 4.58), avec U_{H_2} et U_{O_2} les vitesses d'injection respectivement de l'hydrogène et de l'oxygène. Afin d'établir le plan de stagnation au centre de la géométrie, l'égalité des flux de quantité de mouvement impose la relation (4.59). À partir des équations (4.58) et (4.59), on écrit les conditions limites d'injection en terme de vitesse pour l'oxygène (Eq. 4.60) et l'hydrogène (Eq. (4.61)).

$$a = \frac{|U_{H_2}| + |U_{O_2}|}{d} \quad (4.58)$$

$$\rho_{H_2} U_{H_2} = \rho_{O_2} U_{O_2} \quad (4.59)$$

La simulation de la configuration 4.18 dans un domaine de calcul carré introduit souvent des problèmes numériques notamment dans les coins joignant une surface à débit entrant et une surface à débit sortant. Pour cette raison, la configuration à contre-courant simulée avec AVBP est un domaine dont les limites suivent les lignes de courant, de la forme $xy = cte$, coupées par des sections droites d'entrée et de sortie. Des conditions aux limites glissantes sont appliquées aux parois qui suivent les lignes de courant, et une condition de symétrie est appliquée sur l'axe de symétrie. Les

profils de vitesse injectés respectent eux aussi les formes du champ de vitesse :

$$u_{O_2} = xU_g \text{ et } v_{O_2} = yU_g \quad (4.60)$$

$$u_{H_2} = xU_g R_d \text{ et } v_{H_2} = yU_g R_d \quad (4.61)$$

avec

$$a^* = \frac{2a}{1 + R_d} \quad (4.62)$$

$$R_d = \sqrt{\frac{\rho_{O_2}}{\rho_{H_2}}} \quad (4.63)$$

Pour les cinétiques chimiques qui le permettent (San Diego, H2-12s, H2O2-GL7-1), on utilise le code CANTERA, qui résout un problème pseudo-1D axi-symétrique. Il faut cependant noter que les équations résolues et les méthodes de résolution diffèrent entre CANTERA et AVBP. Notamment, les deux codes ne donnent pas exactement le même profil de vitesse, ce qui peut amener des différences de structure de flamme (Fig. 4.19).⁴ En effet pour un même étirement global, on peut avoir un étirement local assez différent, conduisant à une structure de flamme également différente.

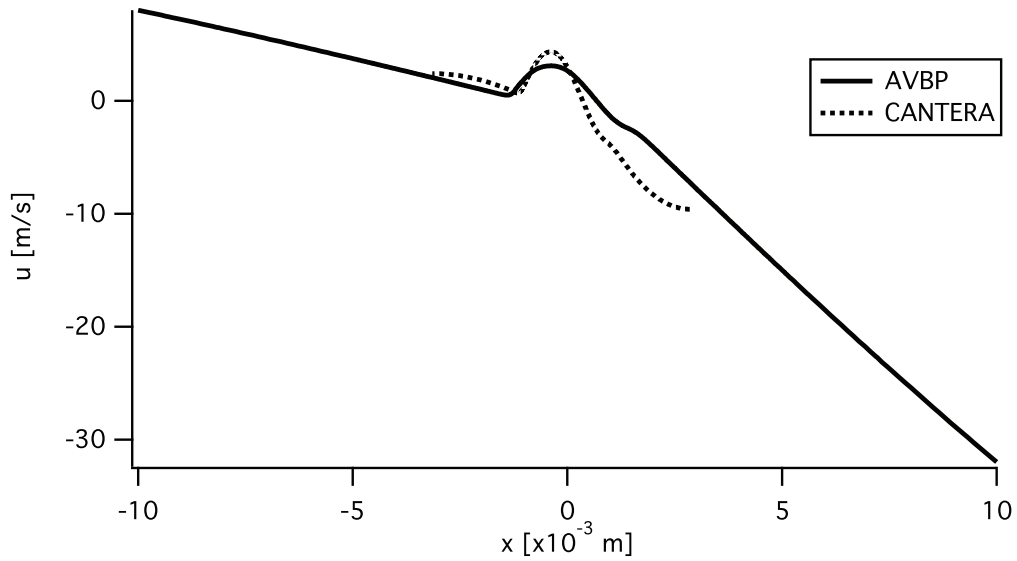


FIGURE 4.19 - *Profils de vitesse au travers d'une flamme non-prémélangée H_2/O_2 à l'étirement $a = 2000s^{-1}$ obtenus avec AVBP et avec CANTERA, utilisant tous les deux le transport AVBP et le schéma H2-12s.*

4. L'obtention de flamme à contre courant étant délicate sur CANTERA, il a été nécessaire de réduire le domaine de calcul. Une telle configuration a pu sur-contraindre l'écoulement et donner des profils de vitesse différents.

4.4.5.2 Structures spatiales et dans le référentiel de fraction de mélange

La Figure 4.20 présente les profils de température et de dégagement de chaleur obtenus pour les quatre cinétiques chimiques. Dans l'espace physique, les calculs CANTERA avec les trois schémas donnent des résultats très similaires. Les profils sont différents de ceux d'AVBP du fait de la différence de profil de vitesse décrite au paragraphe précédent, mais les deux calculs AVBP avec H2-12s et H2-3s donnent des résultats proches. Pour décrire la structure de flamme, on utilisera la définition de la fraction de mélange introduite précédemment Eq. (4.31). Ainsi, les profils dans l'espace de fraction de mélange rendent compte essentiellement de l'équilibre chimie/diffusion et ne sont fonction que du nombre de Damköhler Da . Si la chimie est suffisamment rapide, on s'attend à des profils similaires quelque soit l'écoulement. C'est en effet ce qui est observé sur la Figure 4.20(a) pour la température, sauf pour H2-3s qui surprédit légèrement la température côté pauvre, comme déjà observé en prémélange. Il faut noter que la réaction représentative de la combustion du couple H_2/O_2 est $H_2 + 0.5O_2 = H_2O$, avec une fraction de mélange à la stœchiométrie de $z_{st} = 1/9$. Il est intéressant de noter qu'aucune des cinétiques étudiées ne présente de pic de dégagement de chaleur à z_{st} . Une structure en double pic (un côté riche et un côté pauvre) est retrouvée dans tous les cas. Les cinétiques chimiques H2-3s et H2-12s donnent des résultats très similaires pour le dégagement de chaleur globalement inférieur aux autres cinétiques, avec un équilibre diffusif/réactif légèrement différent. Cependant, la présence du double pic pour ces chimies indique que les deux premières réactions du schéma H2-3s sont bien représentatives de la structure de flamme.

La Figure 4.21 présente les réponses à l'étirement des cinétiques H2-3S et H2-12s calculées respectivement avec AVBP et CANTERA. Au delà de l'écart de profil de vitesse évoqué précédemment, les deux courbes présentent la même pente.

4.5 Remarques concernant le schéma H2-3s

On s'attarde sur le schéma H2-3s utilisé plus tard pour le calcul moteur pour mettre en évidence deux comportements utiles à l'étude des régimes de combustion :

- La réaction (III) (Tab. 4.4, p.99) a été ajoutée au schéma pour améliorer la prédiction du temps d'auto-allumage. L'espèce HO_2 , initialement écartée par AEQS, n'est présente que dans cette réaction. Elle peut donc être considérée comme un radical spécifique à l'allumage. Elle sera donc fortement présente dans les zones d'auto-allumage. Les Figures 4.22 a), b) et c) confirment que quelque soit la richesse du mélange, un pic de radical HO_2 apparaît en amont des flammes de prémélange, en particulier lorsque $\Phi < 1$. Les pics de Y_{HO_2} sont de l'ordre de 10^{-3} (Tab. 4.8). En flamme non-prémélangée (Fig. 4.23), cette espèce est plus rare. Dans une flamme étirée à 2000/s, le pic de fraction massique est d'un ordre de grandeur plus faible qu'en prémélange (Tab. 4.9).
- L'espèce H_2O n'est utilisée que dans la réaction principale d'équilibre entre H_2 et O_2 et sera d'autant plus créée que le mélange brûlé sera proche de la stœchiométrie de la réaction (I).

Dans le cas prémélangé, $Y_{H_2O} \leq 0,72$ (Tab. 4.8). Dans le cas non-prémélangé (Fig. 4.23), on atteint $Y_{H_2O} \sim 0,92$ pour une flamme étirée à 2000/s (Tab. 4.9).

Cette analyse rapide montre que qu'une observation quantitative de certains produits de combustion du schéma H2-3s peut permettre de différencier, certes de manière grossière, le régime prémélangé du régime non-prémélangé.

Φ	Y_{H_2O}	$Y_{HO_2,max}$
0,2	0,22	$1,9 \cdot 10^{-3}$
1	0,72	$4 \cdot 10^{-3}$
8	0,56	$2,3 \cdot 10^{-3}$

TABLE 4.8 - Fractions massiques à l'équilibre de H_2O et maximales de HO_2 pour différentes flammes de prémélange à 1 bar.

$Y_{H_2O,max}$	$Y_{HO_2,max}$
0,92	$3,9 \cdot 10^{-4}$

TABLE 4.9 - Fractions massiques maximales de H_2O et HO_2 dans une flamme non-prémélangée étirée à 2000/s à 1 bar.

4.6 Conclusion : choix du schéma cinétique réduit pour le calcul d'allumage

Au vu des résultats précédents, le schéma H2-12s est celui qui donne les meilleurs résultats sur l'ensemble des cas tests. Les schémas H2O2-GL7-1 et H2-3s ont chacun leurs points forts et leurs points faibles :

- Le schéma H2O2-GL7-1 restitue les bonnes températures de gaz brûlés mais est peu précis sur la vitesse de flamme laminaire, et surtout prédit des délais d'auto-allumage dix fois plus petits que le schéma San Diego de référence.
- Le schéma H2-3s introduit une légère erreur sur la température de gaz brûlés en pauvre, mais fournit de bonnes vitesses de flammes ainsi que de bons délais d'auto-allumage.

Cependant, le schéma trois étapes (cinq espèces et trois réactions), qui a un coût très réduit en termes de mémoire et CPU, est le seul qui permette d'aborder des calculs 3D avec les moyens actuels. Dans la mesure où les calculs d'allumage sont surtout sensibles aux délais d'auto-allumage et aux vitesses de propagation, et où les calculs de chambre envisagés sont à un rapport de mélange riche, on retiendra ce schéma pour la suite de cette étude.

4.6 Conclusion : choix du schéma cinétique réduit pour le calcul d'allumage

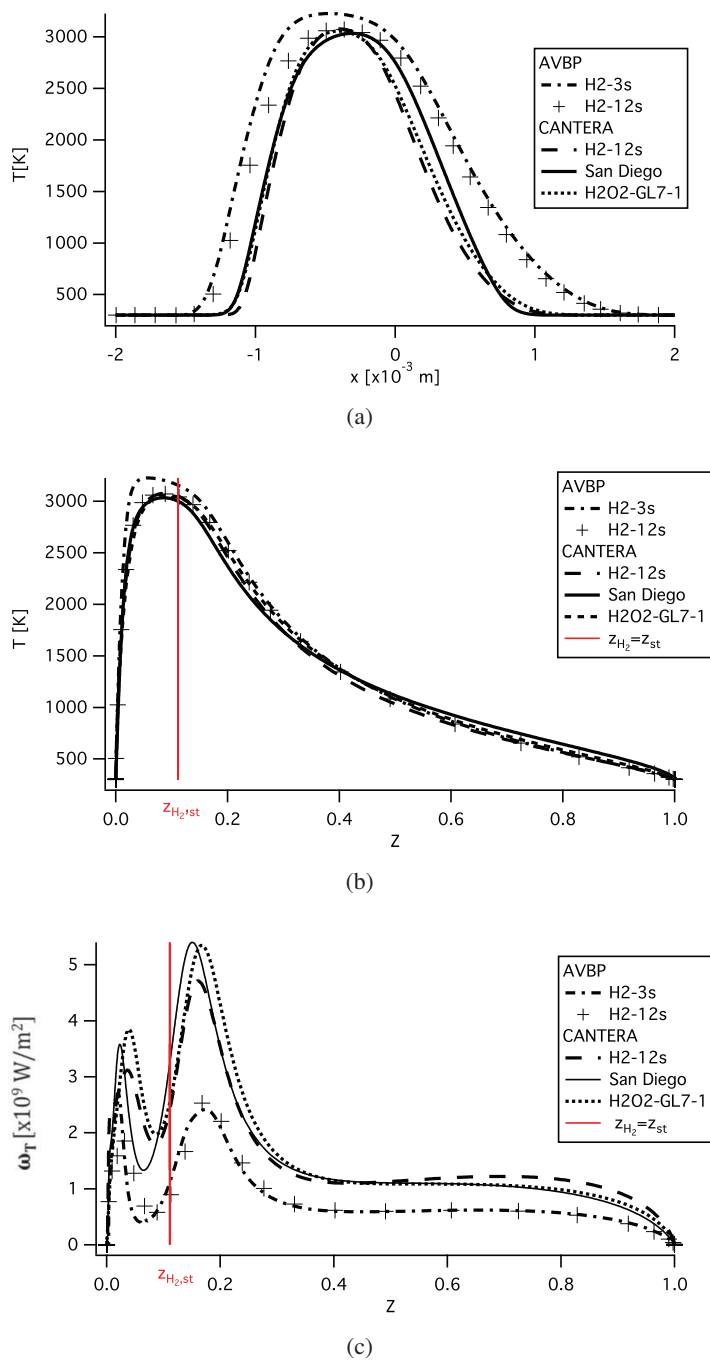


FIGURE 4.20 - Profils de température dans l'espace physique (a), profils de température (b) et de taux de dégagement de chaleur (c) dans l'espace de fraction de mélange au travers d'une flamme non-prémélangée H_2/O_2 à l'étirement $a = 2000 s^{-1}$ avec les différents schémas cinétiques.

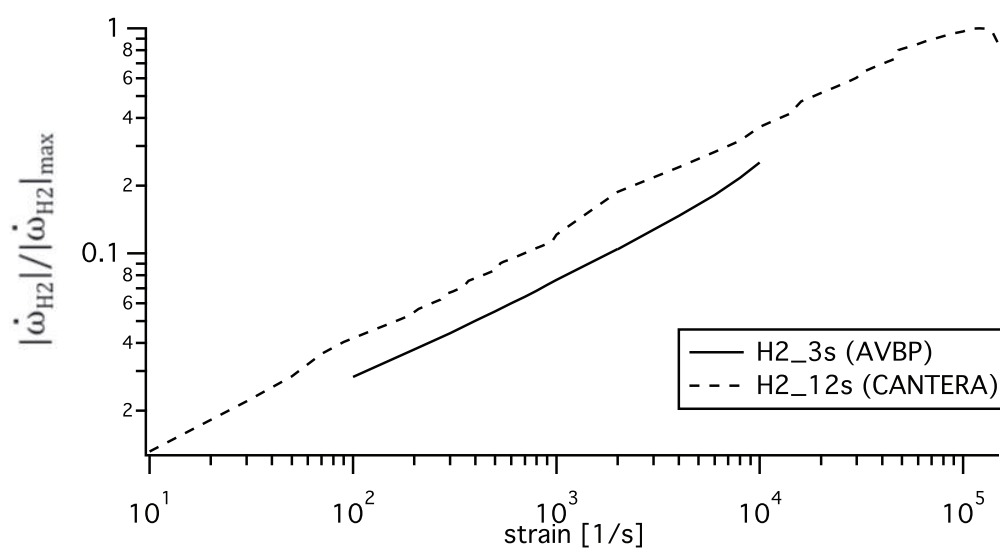


FIGURE 4.21 - Réponse à l'étirement de la cinétique H2-3s (calculé avec AVBP) et de la cinétique H2-12s (calculé avec CANTERA) : taux de consommation normalisé H_2 .

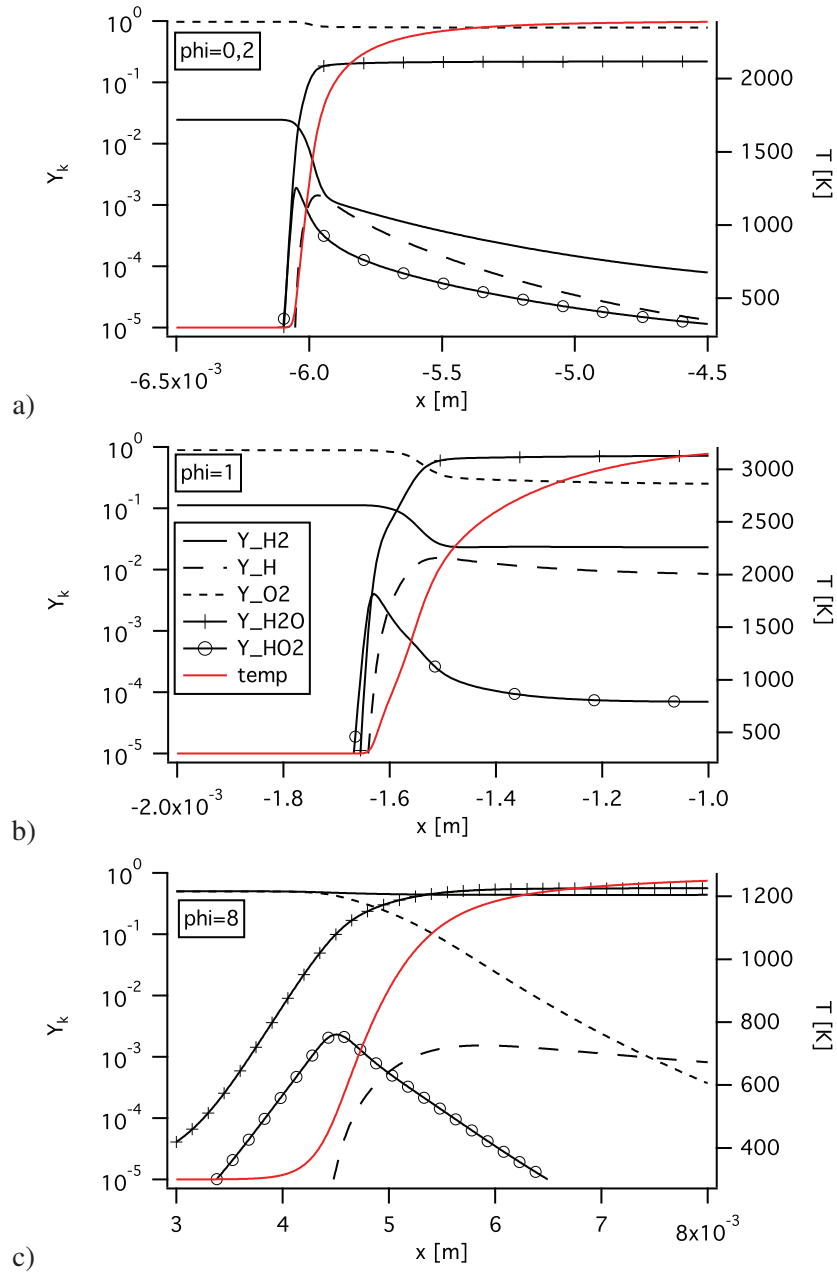


FIGURE 4.22 - Profils des fractions massiques des espèces H_2 , H , O_2 , H_2O et HO_2 et de température pour des flammes prémélangées à richesse $\Phi = 0, 2$ (a), $\Phi = 1$ (b) et $\Phi = 8$ (c) avec la cinétique H2-3s.

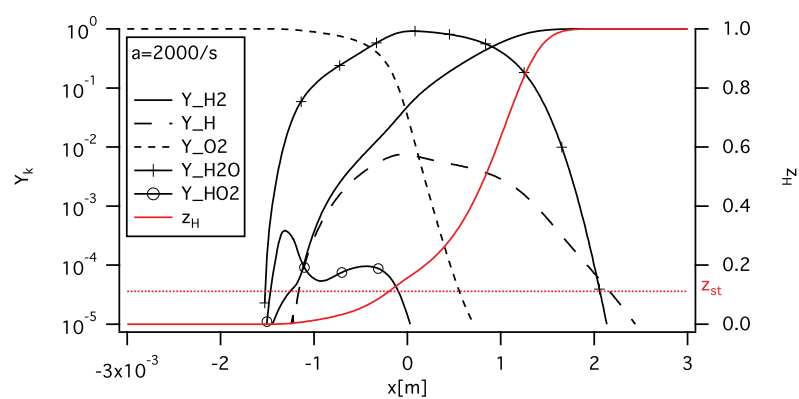


FIGURE 4.23 - Profils des fractions massiques des espèces H_2 , H , O_2 , H_2O et HO_2 et de fraction de mélange z_H pour une flamme non-prémélangée étirée à 2000/s avec la cinétique H2-3s.

Modélisation de la combustion turbulente

5.1 Introduction

Les flammes interagissent fortement avec la turbulence qui contrôle le mélange des réactifs entre eux et avec les autres produits. Dans les calculs où la turbulence n'est pas entièrement résolue (RANS-LES), il est nécessaire d'introduire un modèle de combustion turbulente pour rendre compte de cette interaction. De nombreux modèles de combustion turbulente sont proposés dans la littérature et un état de l'art synthétique est présenté dans ce chapitre. Parmi les différents modèles de combustion pour la LES, le modèle TFLES [Colin et al., 2000, Charlette et al., 2002] présente l'avantage de conserver la description de la cinétique chimique avec une formulation de type Arrhenius. Les travaux de Sengissen [Sengissen et al., 2007] pour les flammes non prémélangées, de Boileau [Boileau et al., 2008b, Boileau et al., 2008a] pour les configurations diphasiques et de Schmitt [Schmitt et al., 2011] pour les conditions supercritiques ont montré également de bons résultats globaux, bien que la formulation originale du modèle TFLES ne soit pas adaptée en théorie au cas des flammes non prémélangées. En réalité, comme on le verra dans ce chapitre, la combinaison du modèle TFLES original avec un modèle de diffusion turbulente compense partiellement l'erreur théorique et permet d'obtenir de bons résultats globaux, mais la structure de flamme reste fautive. Dans le cas des moteurs fusées, la structure de flamme de diffusion joue un rôle essentiel et doit être reproduite le plus fidèlement possible : dans cette étude, nous nous intéressons donc au

développement et à la validation d'une approche de type "TFLES" pour les flammes de diffusion.

5.2 Régimes de combustion turbulente

On utilise les notions de turbulence introduites à la section 3.4 pour définir l'interaction entre la turbulence et la combustion. On y ajoute dans un premier temps la notion d'étirement de flamme dû à la turbulence. Cet étirement $\kappa(r)$ est défini en fonction de la vitesse $u'(r)$ et de la taille r caractéristique de la structure turbulente considérée (Eq. (5.1)). On en déduit la valeur de l'étirement à l'échelle intégrale (Eq. (5.2)) et à l'échelle de Kolmogorov (Eq. (5.3)) :

$$\kappa(r) = u'(r)/r (= 1/\tau_m(r)) = (\varepsilon/r^2)^{1/3} \quad (5.1)$$

$$\kappa(l_t) = \frac{\varepsilon}{u_t'^2} \approx \frac{\varepsilon}{k} \quad (5.2)$$

$$\kappa(\eta_k) = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\nu}} \quad (5.3)$$

Que ce soit pour le cas prémélangé ou non prémélangé, la classification des régimes de combustion est un sujet complexe pour lequel il existe différentes définitions dans la littérature (Borghi [Borghi, 1988], Bray et Peters [Bray and Peters, 1994], Libby et Williams [Libby and Williams, 1994], Peters [Peters, 1991]), souvent basées sur l'interaction flamme/vortex. Cependant, la plupart de ces descriptions ne traitent que les flammes adiabatiques, et décrivent les différents régimes dans l'espace $((u'/s_L^0); (l_t/\delta_L^0))$ sans tenir compte de l'évolution du couple taille-vitesse dans une turbulence développée. On s'appuiera sur la description retenue par Poinot et Veynante [Poinot and Veynante, 2005] pour présenter le cas prémélangé, puis le cas non prémélangé.

5.2.1 Combustion turbulente en prémélange

Grâce aux définitions des caractéristiques des flammes prémélangées de la Sec. 4.3.1), les grandeurs adimensionnées suivantes sont introduites :

- Le **nombre de Damköhler** Da compare le temps caractéristique de la turbulence associé à l'échelle intégrale l_t au temps caractéristique de la combustion τ_c :

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c} = \frac{l_t/u'}{\delta_L/s_L} \quad (5.4)$$

- Le **nombre de Karlovitz** Ka (Eq. 5.5) compare le temps τ_c au temps caractéristique de la turbulence associé à l'échelle de Kolmogorov η_K . Poinot et Veynante [Poinot and Veynante, 2005] donnent une description plus poussée du nombre de Karlovitz avec la relation

5.6 en utilisant $s_L^0 \delta_L^0 = D_{th}$.

$$Ka = \frac{\tau_c}{\tau_K} = \frac{\delta_L^0 / s_L^0}{\eta_K / u'_K} \quad (5.5)$$

$$= \left(\frac{l_t}{\delta_L^0} \right)^{-1/2} \left(\frac{u'}{s_L^0} \right)^{3/2} = \left(\frac{\delta_L^0}{\eta_K} \right)^2 = \frac{\sqrt{\varepsilon/\nu}}{s_L^0 / \delta_L^0} \quad (5.6)$$

- Le **nombre de Reynolds turbulent** Re_t (cf. section 3.4) compare les forces d'inertie aux forces visqueuses est défini par :

$$Re_t = \frac{u' l_t}{\nu} = \frac{u'}{s_L^0} \frac{l_t}{\delta_L^0} = Da^2 Ka^2 \quad (5.7)$$

L'approche spectrale de Poinso, Veynante et Candel [Poinso et al., 1991] se démarque par sa vision plus globale de la turbulence. La Figure 5.1 a) est un diagramme spectral représentant l'interaction flamme prémélangée/vortex. Si l'on définit $P_0(r)$ la puissance du vortex de taille r comme le rapport des temps caractéristiques du vortex (r^2/ν) et de la chimie (δ_L^0/s_L^0), on obtient :

$$P_0(r) = \frac{r^2 s_L^0}{\nu \delta_L^0} \approx \left(\frac{r}{\delta_L^0} \right)^2 \quad (5.8)$$

$P_0(r)$ permet alors d'évaluer la longueur de pénétration du vortex dans le front de flamme (avant d'être dissipé). Lorsque $P_0(r) < 1$, le vortex est dissipé par le régime visqueux. Pour finir, la ligne de turbulence rejoint le point caractérisant le vortex à sa "création" dans le domaine au point sur la ligne de Kolmogorov où il sera dissipé. Ce graphique étant en échelle log-log, la ligne de turbulence a une pente constante de 1/3 car on suppose $\varepsilon = u'^3/r$ constant entre η_k et l_t . Son utilisation est présentée sur la Figure 5.1 b) qui représente quatre vortex (A,B,C,D) avec leur évolution turbulente respective. La correspondance de ces quatre vortex dans une représentation classique se trouve sur la Figure 5.1 c). Les différents régimes de flamme décrits sont :

- Le **régime de flamelette plissée** ("wrinkled flamelets") où le front de flamme est plus ou moins plissé par la turbulence, mais sa structure est considérée localement comme laminaire.
- Le **régime de flamme alvéolée** ("corrugated flamelets") où la structure turbulente est suffisamment rapide pour plisser le front de flamme au point de faire interagir deux parties de la zones de réaction. Dans ce cas, la rencontre de deux zones réactives du même front peut créer (en 2D) une poche de gaz entièrement cernée par un front de flamme. Selon la courbure, positive ou négative, on obtiendra une poche de gaz frais ou une poche de gaz brûlés.
- Le **régime de flamme distribuée** ("distributed reaction zone"), où les plus petites structures de la turbulence risquent d'éteindre la flamme à cause d'un étirement trop élevé et de créer un "trou" dans le front de flamme.

La Figure 5.2 présente des résultats de simulations numériques d'interaction flamme/vortex réalisées par Poinso, Veynante et Candel [Poinso et al., 1990] pour confirmer leur approche spectrale. Le phénomène d'extinction 1 correspond à un *régime de flamme alvéolée*, le phénomène d'extinction 2 correspond à un *régime de flamme distribuée*. Ces résultats ont également été confirmés par les expériences de Roberts [Roberts et al., 1993].

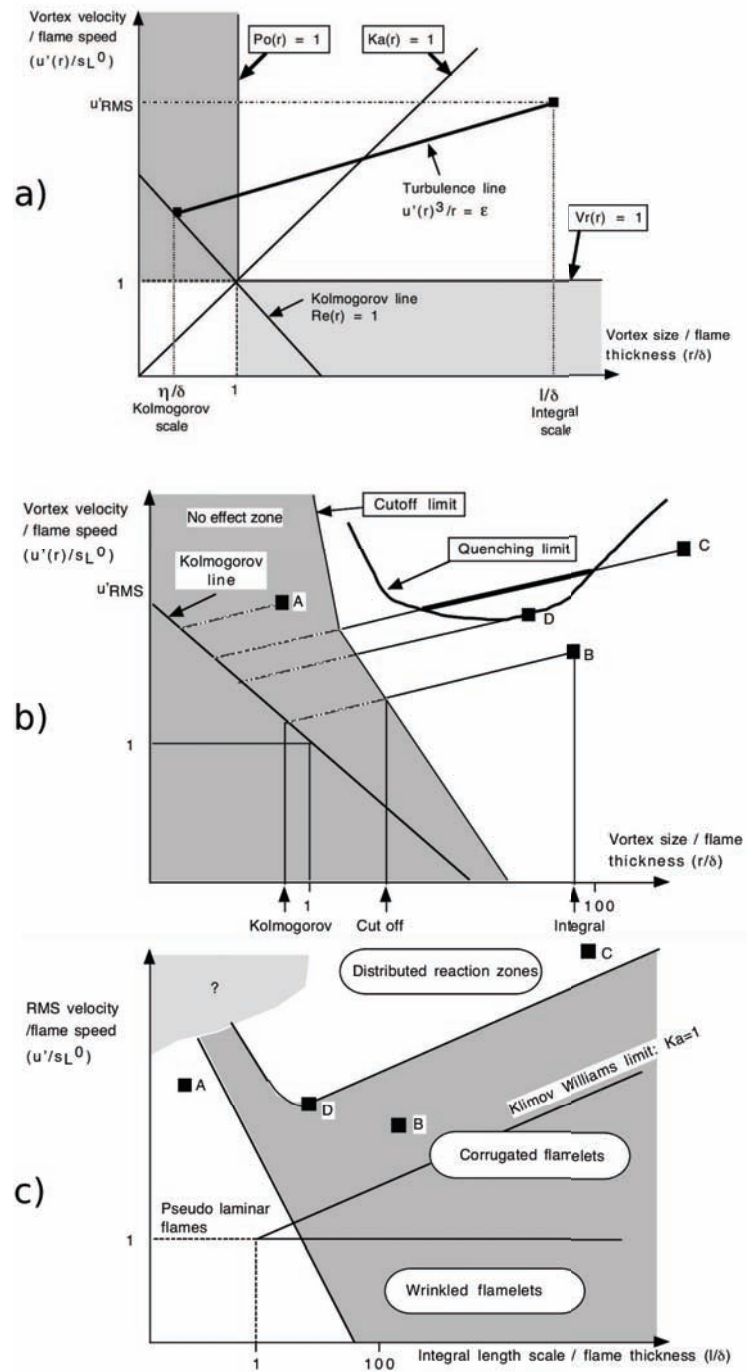


FIGURE 5.1 - Explication a) et utilisation b) d'un diagramme spectral pour l'interaction flamme prémélangée-vortex, avec la correspondance c) dans l'espace $((u'/s_L^0); (l_t/\delta_L^0))$. Figures copiées de [Poinso and Veynante, 2005], initialement tirées de [Poinso et al., 1991].

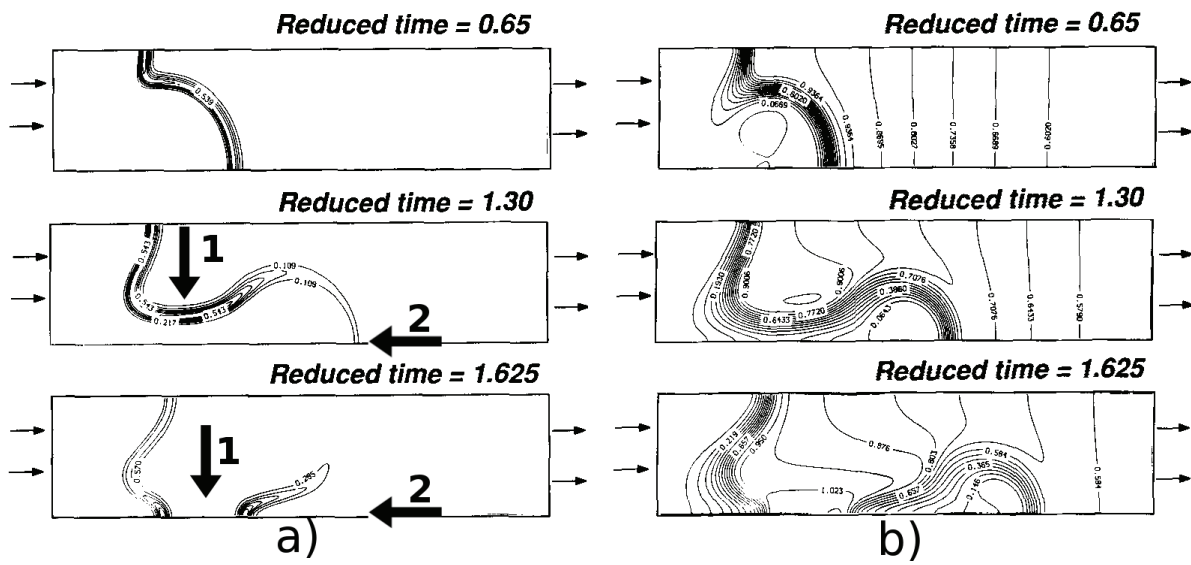


FIGURE 5.2 - Champs de taux de réaction a) et de température b) à trois instants lors d'une interaction flamme/vortex menant à l'extinction, extrait de [Poinso et al., 1990].

5.2.2 Combustion turbulente non-prémélangée

On reprend maintenant les notations décrites dans la section 4.3.2 relatives aux flammes de diffusion. La Figure 5.3 représente les différentes échelles caractéristiques que l'on rencontre dans les flammes non prémélangées turbulentes. Dans le cas d'une turbulence homogène isotrope (3D), l'étirement maximal et le plus petit temps caractéristique correspondent à l'échelle de Kolmogorov :

$$\kappa_K = \frac{u'_K}{\eta_K} = \frac{1}{\tau_K} \quad (5.9)$$

À cette échelle, l'épaisseur de diffusion (l_D) et le temps caractéristique du fluide τ_{fl} s'écrivent :

$$l_D \approx \frac{\sqrt{D}}{\sqrt{\kappa_K}} \sim \frac{\sqrt{D}}{(\varepsilon/\nu)^{1/4}} \sim (\nu^3/\varepsilon)^{1/4} \sim \eta_K \quad (5.10)$$

$$\tau_{fl} = 1/\kappa_K \sim \tau_K \quad (5.11)$$

$$\text{Ce qui donne : } Da_K = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\nu}} \frac{1}{\tau_c} \quad (5.12)$$

$$(5.13)$$

À l'échelle intégrale, on trouve directement

$$Da = \frac{l_t}{u' \tau_c} \quad (5.14)$$

Ces deux nombres de Damköhler sont liés par la relation :

$$Da \approx \sqrt{Re_t} Da_K \quad (5.15)$$

De la même manière que pour les flammes prémélangées, Cuenot et Poinot [Cuenot and Poinot,

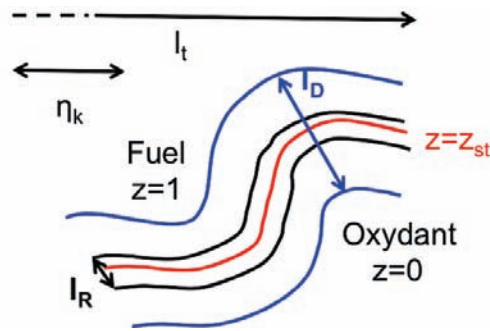


FIGURE 5.3 - Echelles caractéristiques d'une flamme turbulente non-prémélangée.

1994] ont étudié l'influence de la courbure au passage d'un vortex à travers le front de flamme pour étudier plus en détail les régimes de combustion. La Figure 5.4 représente un diagramme spectral des différentes tendances de l'interaction d'une flamme de diffusion laminaire avec un vortex (r, u') . Le diagramme représente quatre points caractéristiques :

Cas A : On ne voit pas d'effet de courbure ni d'effet instationnaire. La flamme est dans un régime de flamelette ("Laminar Flamelet Assumption" : LFA).

Cas B : Pour un r faible et une vitesse u' suffisamment forte pour empêcher le vortex de disparaître, la flamme subit de fortes instabilités dues à un fort rayon de courbure.

Cas C : Comme dans le cas A, on ne voit pas d'effet de courbure. Cependant, des effets d'instationnarité sont dus au retard avec lequel la flamme s'adapte à l'étirement qui lui est imposé.

Cas D : L'extinction de la flamme est due à un étirement très fort. Le nombre de Damköhler à l'extinction est plus élevé que dans une configuration de flamme stationnaire.

Cette représentation a été reprise entre autres par Thévenin [Thevenin et al., 2000], conduisant à la Figure 5.5 qui présente un diagramme spectral complété par des résultats expérimentaux sur des configurations de flamme-vortex. Ces résultats sont cohérents avec ceux de Cuenot [Cuenot and Poinot, 1994]. Les différents domaines définis sont :

Cas I à III : Les vortex n'ont aucun effet.

Cas IV : Des effets modérés du plissement et de la courbure sont observés.

Cas V : Un épaississement de la zone de réaction, associé à de forts effets de courbure et de plissement, entraînent l'extinction.

Cas VI : De forts effets de plissement et d'enroulement de la flamme sont observés, sans extinction.

Cas VII : Idem VI, avec la formation de poches d'oxydant qui brûlent dans la partie fuel du domaine.

Cas VIII : Le plissement et l'enroulement sont toujours très forts, mais des extinctions se produisent au centre.

Ceci permet de représenter de manière très simplifiée quatre modes de combustion dans un diagramme classique (Fig. 5.6) :

- Pour les cas où $Re_t < 1$, on se place dans un cas laminaire.
- Lorsque le temps chimique est très petit, la flamme peut supporter des étirements à l'échelle de Kolmogorov en gardant une structure proche d'une flamme laminaire (régime de flammelles). On introduit alors un Damköhler Da^{LFA} exprimant la limite de l'hypothèse de flammelle. Pour ce régime, on a donc $Da > Da^{LFA}$ et $l_{D,min} \sim \eta_K$.
- Lorsque τ_c augmente, les petites structures de la turbulence entraînent des effets instationnaires pour la flamme.
- Lorsque τ_c augmente encore, l'extinction est atteinte ($Da \sim Da^{ext}$).

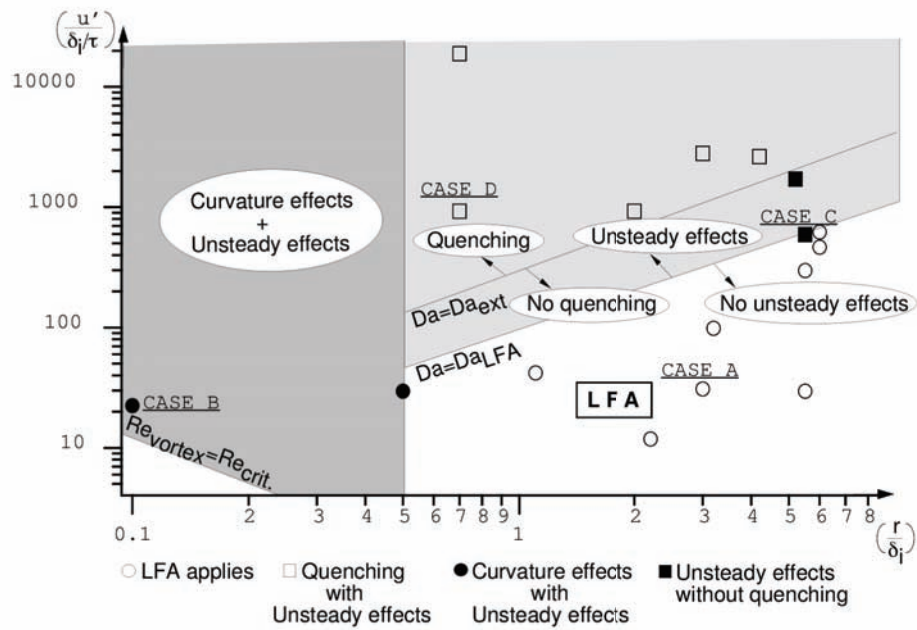


FIGURE 5.4 - Diagramme spectral de combustion non-prémélangée en interaction flamme-vortex en fonction des rapports de temps et d'échelle en échelle log-log. Source [Poinso and Veynante, 2005].

De plus, les travaux de Cuenot et Poinso [Cuenot and Poinso, 1994, Cuenot and Poinso, 1996] montrent que, à cause des effets d'instationnarité, le nombre de Damköhler à l'extinction pour une flamme turbulente Da^{ext} peut être plus faible que pour une flamme stationnaire.

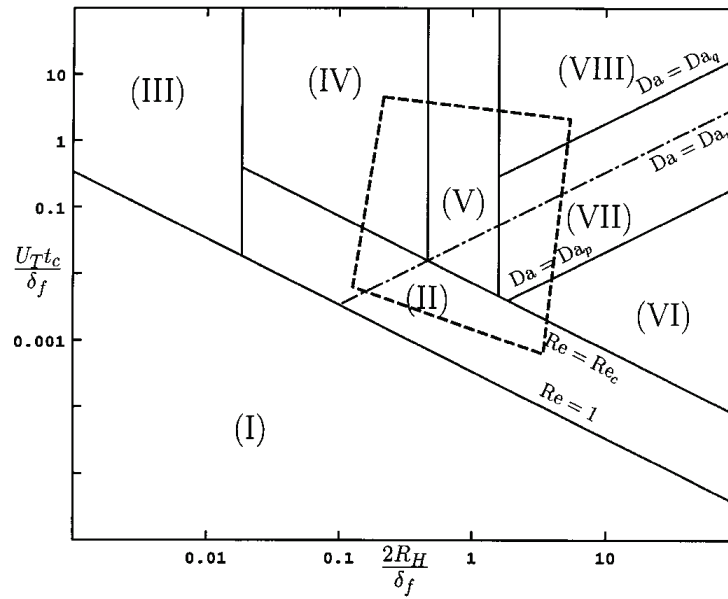


FIGURE 5.5 - Diagramme spectral de combustion non-prémélangée turbulente. La zone délimitée par les pointillés représente le domaine accessible par l'expérience. Source [Thevenin et al., 2000].

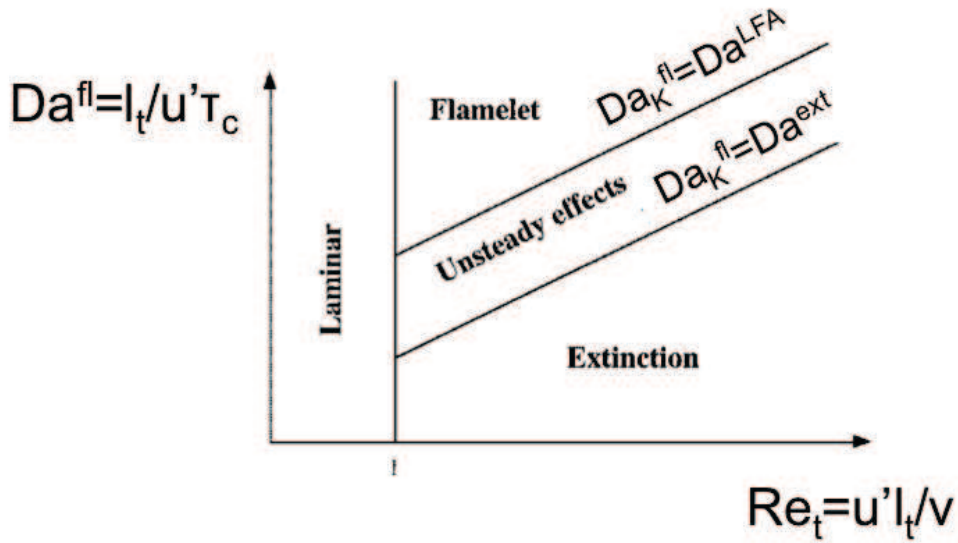


FIGURE 5.6 - Diagramme de combustion non-prémélangée turbulente en fonction du nombre de Damköhler et du nombre de Reynolds turbulent en échelle log-log. Source [Poinsot and Veynante, 2005].

5.3 Modélisation de la combustion turbulente prémélangée : le modèle DTFLES

L'idée de la flamme épaissie a été initialement proposée par Butler et O'Rourke [Butler and O'Rourke, 1977]. Ces travaux ont ensuite été repris par Angelberger et al. [Angelberger et al., 1998] suivi de Colin et al. [Colin et al., 2000] pour créer le modèle DTFLES (Dynamically Thickened Flame for Large Eddy Simulation). On en rappelle ici brièvement le principe [Poinsot and Veynante, 2005].

5.3.1 Propriétés des flammes prémélangées

On considère un schéma cinétique à une étape¹ dont on écrit le taux de réaction sous la forme de la loi d'Arrhénius (eq. 3.18). On peut écrire la vitesse de flamme et son épaisseur en fonction du coefficient de diffusion thermique D_{th} et du facteur pré-exponentiel A (Williams [Williams, 1985], Kuo [Kuo, 2005]) :

$$s_L^0 \propto \sqrt{D_{th}A} \quad (5.16)$$

$$\delta_L^0 \propto \frac{D_{th}}{s_L^0} = \sqrt{\frac{D_{th}}{A}} \quad (5.17)$$

Butler et O'Rourke [Butler and O'Rourke, 1977] proposent l'idée d'augmenter l'épaisseur de la flamme de prémélange d'un coefficient F , tout en conservant sa vitesse laminaire et donc son taux de consommation, en agissant sur D_{th} et A pour obtenir D_{th}^* et A^* :

$$D_{th}^* = F \times D_{th} \quad (5.18)$$

$$A^* = A/F \quad (5.19)$$

En remplaçant D_{th} et A par D_{th}^* et A^* dans les relations (5.16) et (5.17), on obtient des nouvelles expressions pour la vitesse et l'épaisseur de flamme prémélangée laminaire, notées respectivement s_L^{0*} et δ_L^{0*} :

$$s_L^{0*} = s_L^0 \quad (5.20)$$

$$\delta_L^{0*} = F \times \delta_L^0 \quad (5.21)$$

Cette modification permet de conserver la vitesse de flamme alors que l'épaisseur de la zone réactive est augmentée d'un facteur F . En choisissant habilement la valeur de F , la flamme épaissie devient suffisamment large pour être résolue sur le maillage LES. Légier [Légier et al., 2000] développe une version dynamique du modèle TFLES nommée DTF (Dynamic Thickened Flame) consistant à utiliser un senseur pour détecter la présence de la flamme. Cette modification permet d'appliquer le coefficient F dans une zone limitée à la réaction, et de revenir à $F = 1$ en-dehors de la flamme pour ne pas modifier l'écoulement et le mélange en-dehors de la flamme.

1. La démonstration peut être facilement étendue à des schémas multi-étapes.

5.3.2 Cas turbulent

Veynante et Poinso [Veynante and Poinso, 1997] étudient l'utilisation de cet épaississement de flamme dans les écoulements turbulents. Dans le cas d'une flamme turbulente, la modification d'échelle due à l'épaississement artificiel change le nombre de Damköhler puisqu'elle change l'épaisseur de flamme :

$$Da^* = Da/F \quad (5.22)$$

Le nombre de Damköhler est donc diminué, ce qui signifie que la flamme s'éloigne du régime flammelette/flamme plissée et s'approche du régime flamme épaissie. En conséquence, le front est moins plissé et moins étiré, et le taux de consommation turbulent n'est plus conservé. Angelberger et al. [Angelberger et al., 1998] puis Colin et al. [Colin et al., 2000] développent un terme d'efficacité E , qui permet de quantifier le plissement produit par les échelles non résolues de la turbulence. En multipliant le taux de consommation de la flamme modélisée par E , la vitesse de consommation de la flamme est retrouvée (Eq. (5.23)).

La fonction d'efficacité a été développée à partir de DNS [Meneveau and Poinso, 1991, Colin et al., 2000]. Son calcul dépend des rapports de vitesse (u'_Δ/s_L^0) et d'échelle (Δ/δ_L^0) avec Δ la taille du filtre spatial et u'_Δ la fluctuation de la vitesse de sous-maille, et est appliquée comme multiplicateur de la constante préexponentielle A et du coefficient de diffusion D_{th} . En reprenant les relations (5.16) et (5.17), on obtient finalement les relations (5.23) et (5.24), où s_T est la vitesse de flamme turbulente et δ_T est l'épaisseur de flamme turbulente.

$$s_T = E \times s_L^{0*} = E \times s_L^0 \quad (5.23)$$

$$\delta_T = \delta_L^{0*} = F \times \delta_L^0 \quad (5.24)$$

La fonction d'efficacité développée par Charlette et Meneveau [Charlette et al., 2002] que l'on utilisera pour la suite s'écrit :

$$E = \left(1 + \min \left[\frac{\Delta}{\delta_L^0}, \Gamma \frac{u'_\Delta}{s_L^0} \right] \right)^\beta \quad (5.25)$$

Dans cette expression, Γ est une fonction qui tient compte de l'effet d'étirement de toutes les échelles turbulentes plus petites que Δ [Colin et al., 2000, Meneveau and Poinso, 1991] :

$$\Gamma = 0,75 \exp \left[-\frac{1,2}{(u'/s_L^0)^{0,3}} \right] \left(\frac{\Delta}{\delta_L^0} \right)^{2/3} \quad (5.26)$$

On résume le modèle TFLES de la façon suivante :

Coefficient de diffusion :	D_{th}	\rightarrow	$F \times D_{th}$	\rightarrow	$E \times F \times D_{th}$
Constante préexponentielle :	A	\rightarrow	A/F	\rightarrow	$E \times A/F$
			épaississement		plissement

5.3.3 Cas diphasique

En diphasique, lorsque les gouttes sont complètement évaporées avant la flamme, la combustion turbulente se fait uniquement en phase gazeuse et est donc parfaitement modélisée. Dans le cas où le nuage de gouttes est présent dans la zone de flamme, le taux d'évaporation devient un facteur de contrôle de la réaction. On introduit le Damköhler d'évaporation Da_e comme le rapport des temps caractéristiques d'évaporation τ_e et chimique τ_c :

$$Da_e = \frac{\tau_e}{\tau_c} \quad (5.27)$$

Afin de conserver une bonne structure de flamme, Da_e ne doit pas être modifié par l'épaississement. C'est pourquoi, les termes de transfert de masse et de chaleur dus à l'évaporation sont divisés par le coefficient d'épaississement F [Boileau, 2007]. Les travaux de Boileau [Boileau, 2007] ont aussi mis en évidence en DNS qu'une correction du terme de trainée F_d (Eq. (3.71)) est nécessaire pour conserver la vitesse de flamme. Cependant, cette dernière correction n'est utile que dans les cas où les gouttes et le gaz ont de très fortes différences de vitesse, et ne sera pas appliquée ici. Le modèle de flamme épaissie turbulente inclut aussi l'utilisation d'un terme d'efficacité E évaluant le plissement de sous-maille. La structure des flammes turbulentes diphasiques est probablement différente mais en l'absence de connaissances détaillées sur ce sujet, la fonction d'efficacité gazeuse sera conservée pour le cas diphasique. Les modifications à apporter aux relations (3.70) et (3.76) sont résumées ici ² :

Taux d'évaporation :	Γ	\rightarrow	Γ/F	\rightarrow	$E\Gamma/F$
Taux de transfert de chaleur :	Φ	\rightarrow	Φ/F	\rightarrow	$E\Phi/F$
			épaississement		plissement

5.3.4 Epaississement dynamique

Si le modèle TFLES était appliqué dans les zones non réactives, les coefficients de diffusion moléculaire et diffusion thermique seraient modifiés d'un coefficient F . Une méthode d'épaississement dynamique a été développée par Légier [Légier et al., 2000] pour pallier à ce problème : Le coefficient F n'est plus constant, et varie de la valeur F_{max} dans la zone de flamme, à 1 dans les zones non réactives. Ce que l'on note :

$$F = 1 + (F_{max} - 1)\mathcal{S} \quad (5.28)$$

où \mathcal{S} est un senseur sur la température et les fractions massiques

$$\mathcal{S} = \tanh\left(\beta' \frac{\Omega}{\Omega_0}\right) \quad (5.29)$$

2. Les détails de l'implémentation de ce modèle sont disponibles dans le manuel d'AVBP [CERFACS, 2009].

où β' est un coefficient de sensibilité et Ω est une fonction senseur qui permet de détecter la présence du front de flamme. Les calculs menés dans cette thèse utiliseront $\Omega = \omega_T$.

La taille de maille n'étant pas constante dans le domaine de calcul, il est possible d'adapter la valeur de F_{max} pour que localement, l'épaississement impose un nombre de maille dans la flamme épaissie. L'expression de F définie par la relation (5.28) est alors complétée par :

$$F_{max} = \frac{N_c}{\delta_L^0} \Delta x \quad (5.30)$$

où N_c est le nombre de mailles retenues pour résoudre la flamme. Cette méthode nécessite une valeur de référence pour δ_L^0 .

5.4 Modélisation de la combustion turbulente non-prémélangée en LES

Le modèle TFLES, initialement prévu pour les flammes prémélangées a été étendu à des cas de flammes non-prémélangées par Légier [Légier et al., 2002] et Schmidt [Schmitt et al., 2007], diphasiques [Boileau et al., 2008b, Boileau et al., 2008a] et supercritiques [Schmitt et al., 2011]. Cependant, Poinso et Veynante [Poinso and Veynante, 2005] rappellent que cette formulation n'est pas correcte d'un point de vue théorique et posent la question de la pertinence de la fonction d'efficacité. Ils proposent aussi une explication possible aux bons résultats de cette méthode : la plupart des configurations industrielles étudiées ne présentent pas de réels régimes de combustion non-prémélangée mais plutôt des régimes de combustion partiellement prémélangée.

Dans cette section, on va utiliser, comme pour le cas des flammes prémélangées, les propriétés des flammes non-prémélangées pour déterminer une formulation de flamme épaissie.

5.4.1 Épaisseur d'une flamme de diffusion turbulente

D'après la relation (4.45), l'épaisseur de la flamme de diffusion est proportionnelle à l'inverse du gradient de z . Cela signifie qu'en LES, cette épaisseur va naturellement prendre la valeur de $1/|\nabla \tilde{z}|$, c'est à dire du gradient résolu sur le maillage. En d'autres termes, la flamme simulée s'adapte à l'écoulement résolu, ce qui constitue une différence importante avec les flammes de prémélange, qui ont une épaisseur propre. A priori, il n'est donc pas nécessaire d'augmenter artificiellement cette épaisseur pour des questions de stabilité numérique. Par contre, la relation (4.47, p. 106) montre que l'épaisseur de réaction l_R peut poser problème : si la chimie est très rapide ($Da \gg 1$), le taux de réaction élevé se rapproche d'un Dirac (configuration de chimie infiniment rapide), ce qui pourra éventuellement poser des problèmes de résolution numérique en temps (mais pas nécessairement en espace car aucun gradient associé à l'épaisseur de la zone réactive n'est utilisé). Cependant, cette épaisseur résolue, même si elle ne pose pas de problème numérique, n'est pas

nécessairement exacte. Dans le cas d'une LES, la plus petite échelle résolue est l'échelle de coupure l_{cut} (avec $l_t > l_{cut} > \eta_k$). En répétant le raisonnement de la section 5.2.2 à l'échelle de coupure, les relations (5.10) et (5.11) deviennent :

$$l_{D,min} \approx l_{cut} > l_D(\eta_K) \quad (5.31)$$

$$\tau_{fl} = \frac{1}{\chi_{st, \text{RESOLU}}} \approx \frac{1}{\chi_{st}(\kappa(l_{cut}))} = \tau_{cut} > \tau_K \quad (5.32)$$

$$\text{Ce qui donne } Da_{cut} = \frac{\tau_{cut}}{\tau_c} > Da_K \quad (5.33)$$

Et grâce à la relation (4.47), on obtient :

$$l_R \propto l_{D,min} \times Da_{min}^{-1/\nu_t} \approx l_{cut} \times Da_{cut}^{-1/\nu_t} \quad (5.34)$$

L'épaisseur de flamme calculée en LES est donc en générale + grande que son épaisseur réelle, et son régime de combustion est modifié (vers les plus grands Da , ie. vers le régime de flammlette). On notera que :

$$l_{cut} \times Da_{cut}^{-1/\nu_t} = \frac{1}{|\nabla z_{st}|_{cut}} \left(\frac{1}{D|\nabla z|^2 \tau_c} \right)^{-\frac{1}{\nu_t}} \quad (5.35)$$

$$= |\nabla z_{st}|_{cut}^{\frac{2}{\nu_t}-1} (D\tau_c)^{\frac{1}{\nu_t}} \quad (5.36)$$

Dans la cas de la combustion du couple H_2/O_2 , (4.48) devient :

$$\nu_t = \nu_F + \nu_O + 1 = 2,5 \quad (5.37)$$

ce qui donne :

$$l_R \propto \frac{(D\tau_c)^{0,4}}{|\nabla z_{st}|_{cut}^{0,2}} \quad (5.38)$$

Lorsque l'étirement résolu augmente, ie. $|\nabla z_{st}|_{cut}$ augmente, l_D diminue plus rapidement que l_R .

Remarque : Cas des cinétiques chimiques multi-étapes

Pour des mécanismes cinétiques multi-étapes, la création d'espèces intermédiaires s'accompagne de pics de réaction plus fins que la zone réaction globale. Pour une même réaction globale (eg. $2H_2 + O_2 \rightarrow 2H_2O$), les mécanismes cinétiques utilisés peuvent être plus ou moins contraignants à utiliser. Dans le cas des schémas cinétiques H2-12s et H2-3s (Fig 5.7), les espèces supplémentaires OH , O et en particulier H_2O_2 peuvent entraîner des difficultés de résolution temporelle par rapport au schéma H2-3s.

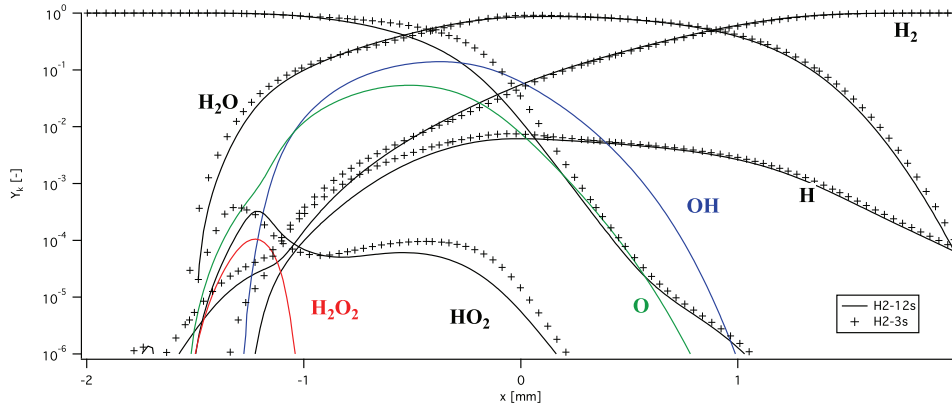


FIGURE 5.7 - Profils des fractions massiques au travers d'une flamme non-prémélangée à contre-courant à 2000/s avec les schémas H2-3s (+) et H2-12s (-).

5.4.2 Dégagement de chaleur d'une flamme de diffusion turbulente

L'épaisseur résolue de la flamme de diffusion a une conséquence directe sur le taux de consommation et le dégagement de chaleur de la flamme. En effet, nous avons vu (Sec. 4.3.2.2) que le taux de consommation/dégagement de chaleur intégré au travers du front d'une flamme de diffusion est, au moins pour les plus faibles valeurs de l'étirement, proportionnel à $\sqrt{\chi_{st}} \propto |\nabla z_{st}| = 1/l_D$. En conséquence, la flamme calculée par la LES brûlera à la vitesse de consommation proportionnelle à $1/l_{cut}$, donc pas forcément à la bonne vitesse qui localement pourrait aller jusqu'à dépendre de $1/l_K$. Cela revient à se déplacer sur la courbe en S des flammes laminaires (Fig. 5.8) de la valeur exacte vers la valeur résolue par la LES plus petite.

De plus, une deuxième conséquence est issu d'un calcul de flamme sans modèle en LES : Comme pour les flammes de prémélange, un défaut de plissement associé à la modification du nombre de Damkhöler de la flamme résolue apparaît par rapport à la flamme réelle.

De même que le modèle TFLES assure un bon comportement global de la flamme prémélangée, le modèle de combustion turbulente pour les flammes de diffusion doit permettre de calculer le bon taux de dégagement de chaleur total, ie intégré au travers de la flamme (quantité équivalente à $s_T = \int HR/(Cp\Delta T)$ en prémélange). En effet, cette quantité contrôle la longueur et la localisation de la flamme turbulente. Le modèle développé par la suite a donc pour but de reproduire correctement cette quantité en LES.

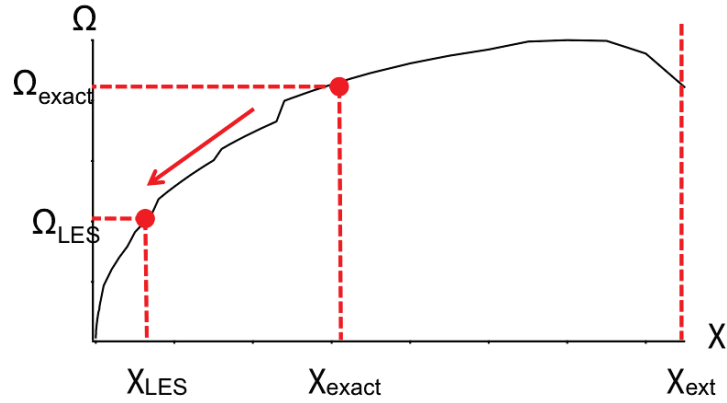


FIGURE 5.8 - Déplacement sur la courbe du dégagement de chaleur intégré sous l'effet du filtrage LES.

5.5 TFLES pour la combustion non-prémélangée

Les deux effets de la LES sur la combustion turbulente non-prémélangée peuvent être interprétés comme dans l'approche à densité de surface de flamme. Si on note Σ la surface de flamme et $\langle \Omega \rangle$ le dégagement de chaleur total (ie. intégré au travers de la flamme) moyen, on écrit :

$$\langle \Omega \rangle = \Omega_{tot} / \Sigma \quad (5.39)$$

$$\text{où } \Omega_{tot} = \int_V \dot{\omega}_T dV \quad (5.40)$$

$$\text{et } \Sigma = \int_{S(z=z_{st})} ds \quad (5.41)$$

De même, en LES, on aura :

$$\langle \Omega \rangle_{LES} = \Omega_{tot} / \Sigma_{LES} \quad (5.42)$$

$$\text{où } \Omega_{LES} = \int_V \dot{\omega}_{T,LES} dV \quad (5.43)$$

Dans le cas de la LES, V représente une cellule du maillage, et Σ_{LES} la surface résolue. La méthode consiste à corriger Σ_{LES} (par une fonction de plissement) et $\langle \Omega \rangle_{LES}$ (par une correction d'étirement) afin de pouvoir retrouver le taux de dégagement de chaleur exact.

5.5.1 Contribution due au filtrage : modélisation de $\langle \Omega \rangle_{LES}^*$

Comme le montre la Figure 5.9, la relation Eq. (4.42) permet d'écrire lorsque l'on se place loin de l'extinction³, ie $\chi_{st} \ll \chi_{ext}$:

$$\Omega \propto \sqrt{D\chi_{st}} \quad (5.44)$$

En utilisant la notation "LES" pour la valeur résolue, on peut facilement estimer le vrai dégagement de chaleur en un point du front de flamme à partir de la valeur calculée Ω_{LES} et du rapport $\chi_{st,LES}/\chi_{st}$ (Fig. 5.9) :

$$\Omega = \Omega_{LES} \sqrt{\frac{\chi_{st}}{\chi_{st,LES}}} \geq \Omega_{LES} \quad (5.45)$$

On peut donc reconstruire le bon taux de consommation Ω en appliquant un facteur $F =$

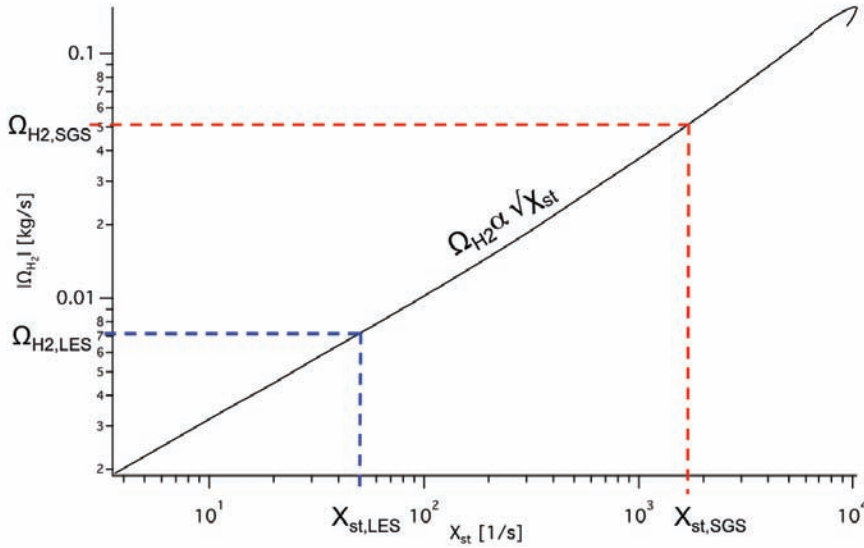


FIGURE 5.9 - Evolution du taux de consommation d'hydrogène intégré au travers de la flamme en fonction de la dissipation scalaire χ_{st} en échelle log-log.

$\sqrt{\chi_{st}/\chi_{st,LES}}$ au taux de consommation Ω_{LES} . En utilisant la dépendance de Ω à \sqrt{D} de la relation (5.44), on obtient :

$$D^* = D \times F^2 \implies \Omega_{LES}^* = \Omega_{LES}(D^*) = \Omega_{LES}(D \times F^2) = F \times \Omega_{LES}(D) = \Omega \quad (5.46)$$

Cette opération a pour conséquence de modifier aussi l'épaisseur diffusive :

$$l_D^* = l_{D,LES} \times F \quad (5.47)$$

3. Dans la mesure où l'on ne s'intéresse ici qu'à une combustion vigoureuse, on ne cherchera pas à corriger l'effet d'extinction.

A l'inverse, l'épaisseur réactive va se rapprocher encore plus d'un Dirac car le nombre de Damköhler augmente.

Pour calculer $\langle \Omega \rangle_{LES}$, on devrait en principe utiliser la distribution de χ_{st} dans la maille et en déduire une distribution de F. Cependant, une bonne approximation de $\langle \Omega \rangle_{LES}$ peut être obtenue à partir d'une moyenne de $\langle \chi_{st} \rangle_{SGS}$ dans la maille et on utilisera :

$$\Omega_{LES}^* = \Omega_{LES} \times \langle F \rangle = \Omega_{LES} \sqrt{\langle \chi_{st} \rangle_{SGS} / \chi_{st,LES}} \quad (5.48)$$

5.5.2 Evaluation de la dissipation scalaire de sous-maille

5.5.2.1 Dissipation scalaire au point stœchiométrique

Le modèle décrit plus haut fait intervenir $\chi_{st} = \chi(z_{st})$ pour tout point au travers de la flamme, i.e. pour toutes les valeurs de z. Donc en tout point du champ, où la fraction de mélange z a une valeur quelconque, il faut pouvoir reconstruire χ_{st} de la flammelle à laquelle le point appartient. Puisque l'on considère que la structure de flamme ne dépend que l'étirement, l'épaisseur de diffusion peut être vue comme couche de diffusion étirée à densité constante, et la relation (4.41) (p.104) donne [Poinot and Veynante, 2005] :

$$\chi = \chi_0 F(z) = \chi_{st} F(z) / F(z_{st}) \quad (5.49)$$

Dans le cas d'une flamme de contre-courant, la Figure 5.10 représente $\chi(z_H) / \chi_{max}$ en fonction de la fraction de mélange z_H pour différentes valeurs de l'étirement.

5.5.2.2 Dissipation scalaire de sous-maille

Si l'on suppose que la dissipation turbulente ε reste constante comme dans le cas d'une turbulence homogène isotrope, on peut utiliser sa définition pour relier les grandeurs caractéristiques à différentes échelles [Colin et al., 2000] :

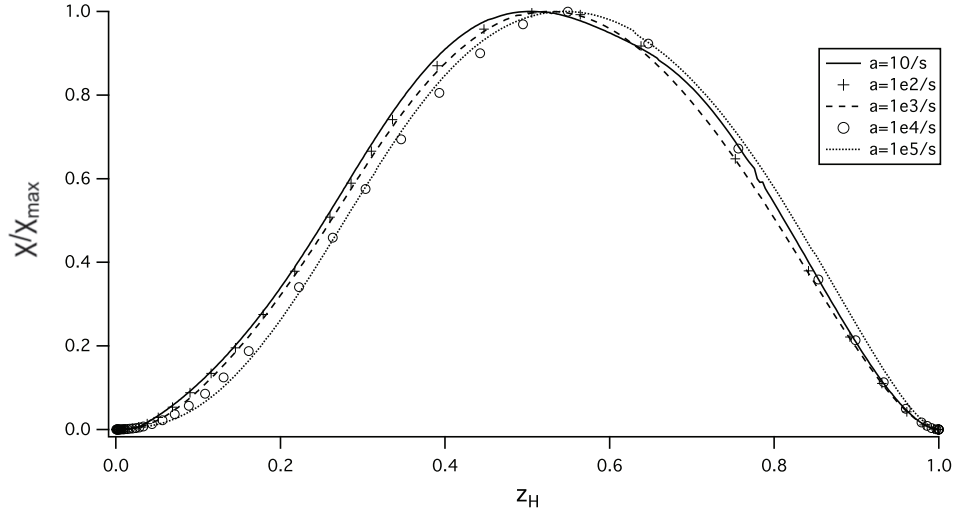
$$\varepsilon = \frac{u'(r)^3}{r} = \frac{r^2}{\tau^3(r)} = r^2 \chi^3 \quad (5.50)$$

Ce qui donne, en appliquant (5.50) à l'échelle de coupure et à l'échelle de Kolmogorov :

$$\chi_{cut}^3 \times l_{cut}^2 = \chi_K^3 \times \eta_K^2 \quad (5.51)$$

En calculant a priori η_K et en supposant que l_{cut} soit égal à n fois la taille du filtre spatial Δx [Colin et al., 2000], on obtient :

$$F = \sqrt{\frac{\chi_K}{\chi_{cut}}} = \sqrt{\left(\frac{n\Delta x}{\eta_K}\right)^{2/3}} \quad (5.52)$$


 FIGURE 5.10 - Evolution de χ/χ_{max} pour différentes valeurs d'étirement.

On suppose :

$$\chi_{cut} = \nu \left(\frac{du}{dx} \right)_{cut}^2 = \chi_{LES} = \nu_t \left(\frac{du}{dx} \right)_{LES}^2 \quad (5.53)$$

On suppose alors que la dissipation scalaire au point stœchiométrique suit la même loi :

$$\frac{\chi_K}{\chi_{cut}} = \left(\frac{l_{cut}}{\eta_k} \right)^{2/3} \quad (5.54)$$

N'ayant pas d'estimation pour la valeur moyenne de sous-maille, on prend la valeur la plus extrême et on évaluera :

$$\langle \chi_{st} \rangle_{SGS} \sim \chi_{st,K} \quad (5.55)$$

En calculant ε à partir de la vitesse caractéristique u'_{Δ_x} à la taille du filtre Δ_x (Eq. (5.56)) [Colin et al., 2000], et en utilisant la relation (3.54) permettant d'estimer l'échelle de Kolmogorov (Eq.

(5.57)), on obtient la relation (5.58) :

$$\varepsilon = \frac{u'^3}{r} = \frac{u'_{\Delta x}{}^3}{\Delta x} \quad (5.56)$$

$$\eta_k = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{1/4} = \left(\Delta x \times \left[\frac{\nu}{u'_{\Delta x}} \right]^3 \right)^{1/4} \quad (5.57)$$

$$F = \left(\frac{\Delta x}{\eta_k} \right)^{1/3} = \left(\frac{\Delta x u'_{\Delta x}}{\nu} \right)^{1/4} \quad (5.58)$$

$$(5.59)$$

Pour estimer $u'_{\Delta x}$, on pourra utiliser par exemple l'opérateur OP_2 de Colin et al. [Colin et al., 2000] développé pour la fonction de plissement.

5.5.3 Contribution due au plissement de sous-maille : Σ_{LES}^*

Une correction due au plissement de sous-maille doit être appliquée pour obtenir la bonne surface de flamme et donc le bon dégagement de chaleur total dans le volume (Fig. 5.11). Cette correction pourra être appliquée de la même manière que dans le cas prémélangé [Colin et al., 2000]. En utilisant une fonction d'efficacité E évaluant le plissement de sous-maille, on peut corriger la surface de flamme :

$$\Sigma_{LES}^* = \Sigma_{LES} \times E \quad (5.60)$$

$$\text{On obtient ainsi } \Omega_{tot,LES}^* = \Omega_{tot} \quad (5.61)$$

Comme pour la correction d'étirement, la correction de Σ ne peut se faire que sur D :

$$D \rightarrow D \times E^2 \Rightarrow \langle \Omega \rangle_{LES}^* \rightarrow \langle \Omega \rangle_{LES}^* \times E \quad (5.62)$$

Les deux corrections s'appliquent aux coefficients de diffusion des espèces (D_k) et de la température ($\lambda/\rho C_p$), ainsi qu'à la diffusion turbulente (D_t).

L'évaluation peut être effectuée dans un premier temps en adaptant la fonction de Colin et al. [Colin et al., 2000]. En prémélange, le taux de plissement peut-être évalué par :

$$\Xi \simeq 1 + \alpha \frac{\Delta_e}{s_L^0} < a_T >_s \quad (5.63)$$

Dans cette expression, on pourra traiter les termes spécifiques au cas prémélangé de la manière suivante :

- Δ_e/s_L^0 est un temps caractéristique en prémélange que l'on remplace par un temps caractéristique en diffusion $1/\chi_{st,LES}$.

- $\langle a_T \rangle_s$ est l'inverse d'un temps caractéristique de l'écoulement de sous maille que l'on remplace par l'inverse du temps caractéristique de l'échelle de Kolmogorov $\chi_{st,K}$

À partir de ces changements :

$$\Delta_e / s_L^0 \longrightarrow 1 / \chi_{st,LES} \quad (5.64)$$

$$\langle a_T \rangle_s \longrightarrow \chi_{st,K} \quad (5.65)$$

on obtient une expression du taux de plissement simplifié :

$$\Xi \simeq 1 + \alpha \frac{\chi_{st,SGS}}{\chi_{st,LES}} = 1 + \alpha F^2 \quad (5.66)$$

qui permet d'obtenir une évaluation du coefficient d'efficacité E :

$$E = \frac{\Xi(LES)}{\Xi(SGS)} \simeq \frac{1 + \alpha F^2}{1 + \alpha} \quad (5.67)$$

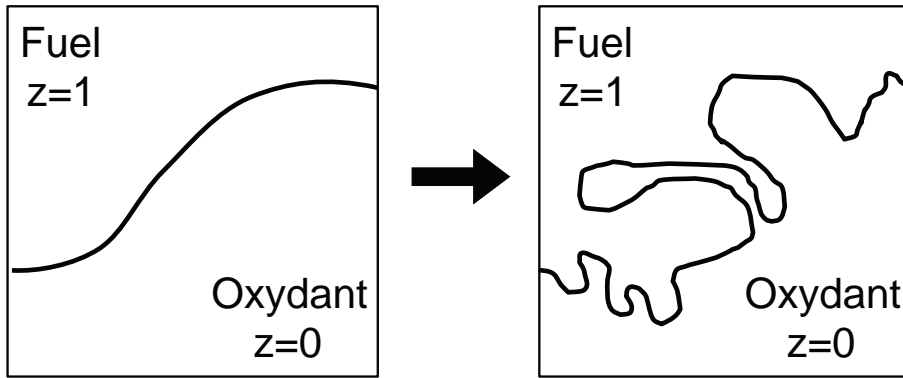


FIGURE 5.11 - Le modèle doit évaluer le plissement de sous-maille de la flamme perdue lors du filtrage LES.

5.6 Résolution temporelle de la chimie rapide

Dans les cas de combustion vive non-prémélangée, on a vu que le taux de réaction peut se rapprocher d'une fonction Dirac lorsque la dissipation scalaire tend vers 0. Il faut donc une stratégie de résolution de cette zone réactive. Dans ce régime de combustion vive, le taux global Ω ne dépend pas de la chimie. Ainsi, si on modifie le facteur pré-exponentiel A, Ω ne change pas tant qu'on reste en régime de combustion vive.

On utilise cette propriété pour introduire le concept de flamme "ralentie", où $A \rightarrow A/S$ sans modifier Ω , ce qui permet de rendre le taux de réaction moins raide. Les relations (5.16) et (5.17) confirment :

$$A^* = A/S \Rightarrow \begin{cases} \tau_c^* = S \times \tau_c \\ \Omega^* = \Omega \end{cases} \quad (5.68)$$

De plus, à partir des relations (4.45), (4.47) et (4.44), on obtient :

$$l_R^* \propto l_D \times (Da^{fl*})^{-1/\nu_t} \propto (\tau_c^*)^{1/\nu_t} \text{ car } l_D \text{ et } \chi_{st} \text{ ne changent pas} \quad (5.69)$$

$$\propto S^{1/\nu_t} l_R \quad (5.70)$$

Ainsi, $\dot{\omega}_{max}$ peut être fortement diminué, ce qui facilite la résolution temporelle. Les Fig. 5.12, Fig. 5.13 et Fig. 5.14 présentent l'influence du paramètre S respectivement sur le taux de consommation de fuel intégré Ω_{H_2} , sur la température maximale T_{max} et sur le taux de consommation $\dot{\omega}_{H_2}$, pour la cinétique chimique H2-12s. On vérifie que, tant que $\tau_c < \tau_c^* \ll \tau_{fl}$ ($Da^* \gg 1$), Ω_{H_2} et T_{max} ne sont pas ou peu influencés par le ralentissement, et que le terme source chimique est moins raide

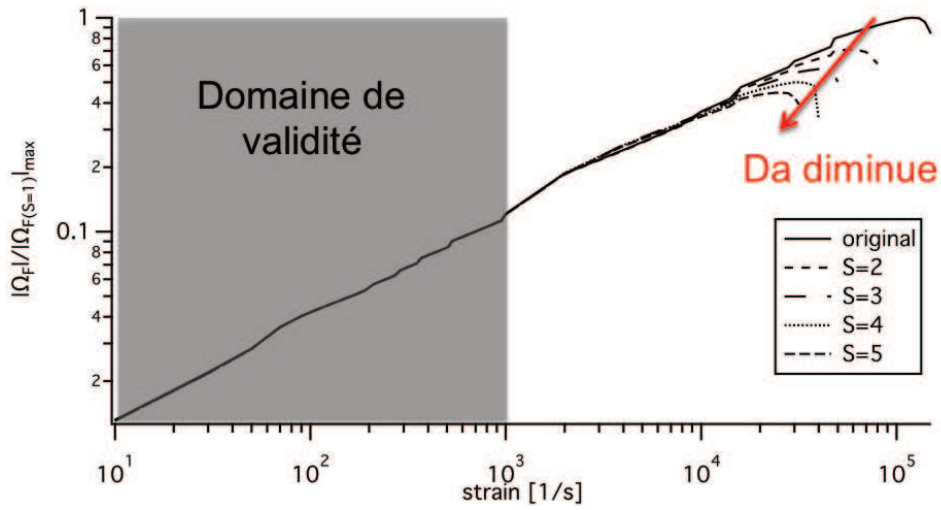


FIGURE 5.12 - Evolution du taux de consommation d'hydrogène intégré au travers de la flamme (normalisé) en fonction de l'étirement, pour différentes valeurs de S . Schéma H2-12s.

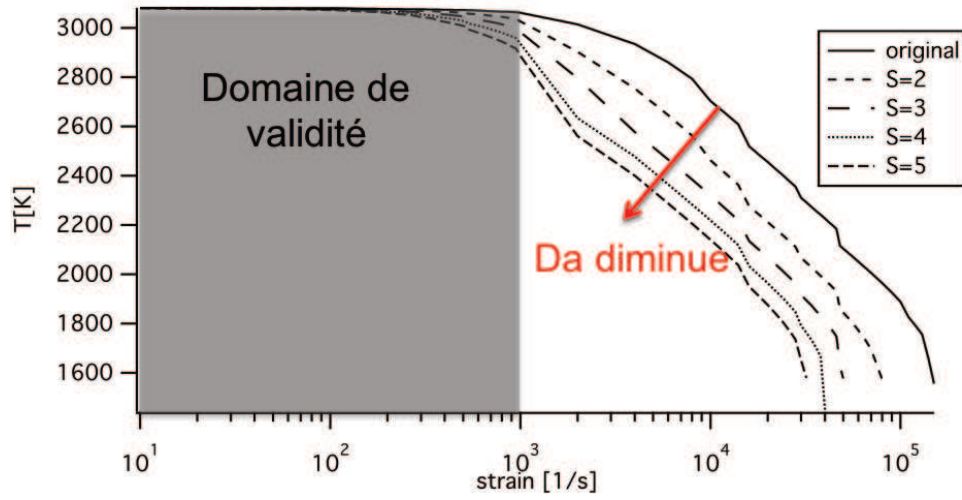


FIGURE 5.13 - Evolution de la température maximale en fonction de l'étirement, pour différentes valeurs de S . Schéma H2-12s.

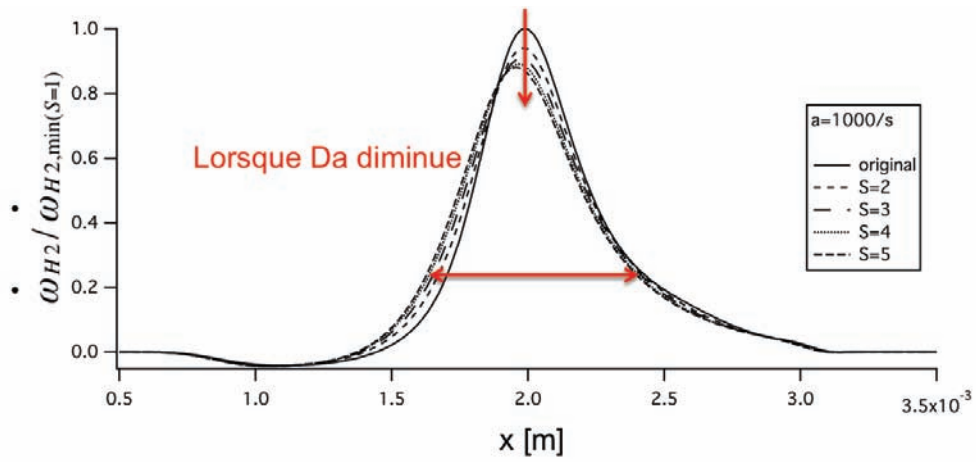


FIGURE 5.14 - Comparaison du taux de consommation de l'espèce H_2 normalisé par la valeur minimale à $S = 1$ d'une flamme de diffusion étirée à 1000/s, pour différentes valeurs de S . Schéma H2-12s.

5.6.1 Limite de validité de la flamme ralentie

La vitesse de consommation de la flamme de diffusion est contrôlée par la diffusion si $Da \gg 1$. Cette condition permet de définir la limite supérieure pour S :

$$Da^* = Da/S_{max} = 1 \implies S_{max} = Da \quad (5.71)$$

La valeur de S est déterminée par la contrainte de résolution temporelle. Typiquement, on souhaite que le pas de temps d'intégration reste contrôlé par la dynamique :

$$\tau_c^* \geq \Delta t_{CFL} \implies S \sim \frac{\Delta t_{CFL}}{\tau_c} \quad (5.72)$$

Où Δt_{CFL} est le pas de temps CFL. Le nombre de Damköhler devient :

$$Da^* = \frac{1}{\chi \Delta t_{CFL}} = \frac{l_D^2}{D \Delta t_{CFL}} = \frac{l_D^2 u}{D \Delta x} \sim \frac{\Delta t_{diffusif}}{\Delta t_{convectif}} \sim \text{Peclet} \quad (5.73)$$

Pour résumer, le concept de flamme ralentie s'écrit :

$$A^* = A/S \implies \begin{cases} \tau_c^* \sim \tau_c \times S = \tau_c \times \Delta t \tau_c \\ l_R^* \sim l_R \times S^{1/\nu_t} \end{cases} \quad (5.74)$$

$$(5.75)$$

5.7 Validation sur une flamme de couche de mélange turbulente

Pour valider a posteriori le modèle TFLES de flamme de diffusion turbulente décrit plus haut, une configuration de couche de mélange a été choisie. Cette configuration consiste à injecter séparément deux fluides, dans la même direction, la différence de vitesse créant un cisaillement qui génère de la turbulence à la frontière des deux fluides. Dans le cas étudié ici, de l'hydrogène et de l'oxygène sont injectés séparément. Les résultats de calculs DNS sont comparés à des calculs LES avec et sans modèle.

5.7.1 Géométrie de calcul et configuration testée

La géométrie étudiée reprend la configuration de Ruiz [Ruiz, 2012]. Une plaque représentant la lèvre d'un injecteur, d'épaisseur h et de longueur $h/2$ sépare un écoulement d'hydrogène d'un écoulement d'oxygène. Le domaine de calcul mesure $10h$ de hauteur pour $11h$ de longueur (Fig 5.15). Une bande de $0,5h$ le long de la condition de sortie sera utilisée pour appliquer de la viscosité artificielle pour limiter les problèmes sur la condition limite. Le domaine utile est donc un carré

de coté $10h$. Des conditions de symétrie sont appliquées aux frontières supérieures et inférieures. On fixe la pression de sortie (frontière de droite). Les parois de la plaque de séparation sont adiabatiques et non glissantes. A l'entrée du domaine, des profils d'écoulement turbulent établi sont utilisés avec une taille caractéristique de $9h$ (demi diamètre d'écoulement vaut $4,5h$) pour chaque entrée, en supposant que chaque entrée de fluide représente un demi conduit avec une condition de symétrie. Les vitesses caractéristiques des écoulements d'oxygène et d'hydrogène sont notées respectivement U_{O_2} et U_{H_2} . La cinétique chimique $H_2 - 3s$ est utilisée. La Tab. 5.1 récapitule les valeurs numériques des différents paramètres de la configuration.

On utilisera deux maillages : un maillage DNS avec $dx \approx 3,75 \cdot 10^{-6} m$ et un maillage LES avec

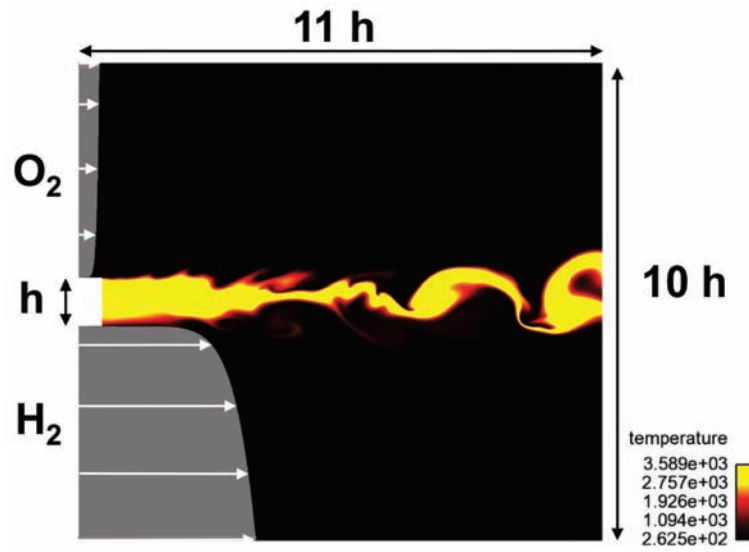


FIGURE 5.15 - DNS d'une couche de mélange turbulente réactive : champ de température, et profils de vitesse d'injection.

	T [K]	ρ_{inj} [kg/m^3]	U_{inj} [m/s]	Re
O_2	300	8,3437	30	$1,4 \cdot 10^5$
H_2	300	0,5256	250	$7,6 \cdot 10^4$
h	1,5 mm			
P	5 bar			

TABLE 5.1 - Paramètre de la configuration de calcul de la couche de mélange.

$dx \approx 9 \cdot 10^{-6} m$. Le point de fonctionnement a été choisi pour permettre le développement d'une flamme turbulente sans trop augmenter le coût du calcul. D'une part, la présence de gaz chauds dans la couche de cisaillement rend l'écoulement plus visqueux dans la couche de mélange, et

donc moins sensible à la turbulence. D'autre part, l'épaisseur de la zone de réaction δ_f est fonction de la pression [Ribert et al., 2008] :

$$\delta_f \sim 1/\sqrt{P} \quad (5.76)$$

L'étude de Ruiz [Ruiz, 2012] a été effectuée à 100 bar. En choisissant une pression égale à 5 bar, la zone de réaction sera a priori 4,5 fois plus large. Quant à la plaque séparatrice, son épaisseur h est choisie égale à 1,5mm, afin de créer rapidement de grosses structures qui étirent la flamme.

5.7.2 Méthodologie

Le principe de cette étude consiste à calculer, à partir d'une même solution initiale, l'évolution de la flamme dans une configuration turbulente en DNS et LES. Les grandeurs extraites sont :

- l'étirement moyen $\langle \chi_{st} \rangle$ à partir de χ_{st} sur l'isoline $z = z_{st}$.
- la longueur Σ de la "surface" de flamme en mesurant la longueur de l'isoline $z = z_{st}$.

Pour chaque solution retenue, on compare les grandeurs extraites des deux calculs pour obtenir les coefficients d'épaississement F et d'efficacité E définis aux sections précédentes :

$$F = \sqrt{\frac{\langle \chi_{st,DNS} \rangle}{\langle \chi_{st,LES} \rangle}} \quad (5.77)$$

$$E = \frac{\Sigma_{DNS}}{\Sigma_{LES}} \quad (5.78)$$

Enfin, on moyenne ces coefficients sur le nombre de solutions retenues pour obtenir les coefficients à utiliser pour un calcul LES avec modèle. Dans le cas du coefficient F , on ne retiendra que les premiers instants de ces simulations ($\Delta t = 0,075ms$), afin obtenir une approximation de l'effet du filtrage de la LES sur la structure turbulente. Dans le cas du coefficient E , on a besoin d'avoir une turbulence établie pour comparer les plissements de chaque configuration, c'est pourquoi on choisit de calculer E sur $2ms$.

5.7.3 Initialisation

Le calcul initial est effectué avec le maillage LES. Le domaine de calcul décrit à la Sec. 5.7.1 est initialement au repos. L'écoulement est dans un premier temps calculé en non réactif, puis la configuration est allumée en remplaçant le mélange compris dans la zone $0,09 < z_H < 0,13$ par un mélange de gaz brûlés à la stœchiométrie. On poursuit ensuite le calcul pendant plusieurs temps convectifs de manière à obtenir une couche de mélange réactive avec une turbulence établie.

On choisit ensuite une solution du calcul LES comme solution initiale que l'on interpole sur le maillage DNS. Les Fig 5.16 et Fig. 5.17 présentent respectivement les premiers instants des calculs DNS et LES. Dès le premier instantané (Fig 5.16 a et Fig 5.17 a), on observe que la forme globale

de la flamme du calcul DNS est plus complexe, un peu plus fine et contient plus de petites structures turbulentes que celles du calcul LES. Dans les deux calculs, on retrouve la structure en double pics du dégagement de chaleur (Sec. 4.20, p. 127). Cependant, l'épaisseur de la zone réactive n'étant pas négligeable devant celle du domaine, on observe de temps en temps de fortes atténuations de $\dot{\omega}_T$ pour l'un des deux pics.

Comme expliqué précédemment, on extrait l'étirement moyen $\langle \chi_{st} \rangle$ et la surface de flamme Σ . Ces valeurs sont énumérées dans le tableau 5.2. L'étirement moyen reste bien inférieur dans le calcul LES. Cependant, on constate que la surface flamme est plus grande dans le calcul LES que dans le calcul DNS. Ceci peut s'expliquer par le filtrage des plus petites structures en LES. D'un point de vue local, les plus petites structures de la DNS ne peuvent agir sur la flamme en LES, mais d'un point de vue global, seules les plus grandes structures agissent sur la flamme. La surface de la flamme sera donc plissée par des structures moins nombreuses mais de plus grandes amplitudes.

À partir de la relation (5.45), on en déduit le coefficient F :

$$F = \langle \sqrt{\frac{\chi_{st,DNS}}{\chi_{st,LES}}} \rangle \approx 1,27 \quad (5.79)$$

$$E = \langle \sqrt{\frac{\Sigma_{DNS}}{\Sigma_{LES}}} \rangle \approx 1,1232 \quad (5.80)$$

calcul	instant [ms]	$\langle \chi_{st} \rangle$ [1/s]	Σ [m]
DNS	0,025	684,4653	0,02077364
	0,05	614,3654	0,02006223
	0,075	761,3842	0,02042624
LES sans TFLES	0,025	427,9411	0,0218801
	0,05	310,5858	0,02181822
	0,075	595,9056	0,02178143

TABLE 5.2 - Comparaison des valeurs de $\langle \chi_{st} \rangle$ et Σ pour trois instants t proches du début de la comparaison à $t = 8,42\text{ms}$.

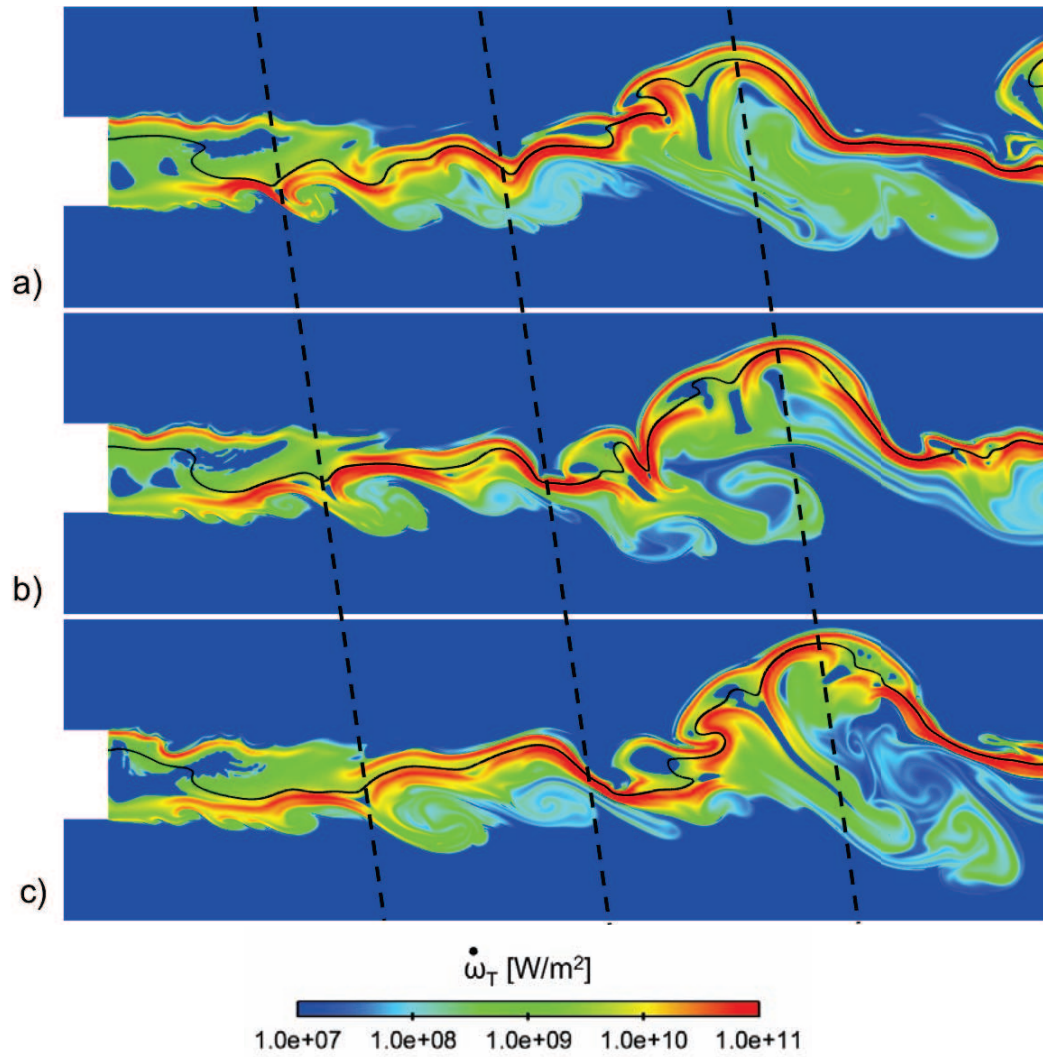


FIGURE 5.16 - Evolution du champ de dégagement de chaleur et de la ligne de stœchiométrique dans le cas DNS à $t = 0,025\text{ms}$ a), $t = 0,050\text{ms}$ b) et $t = 0,075\text{ms}$ c).

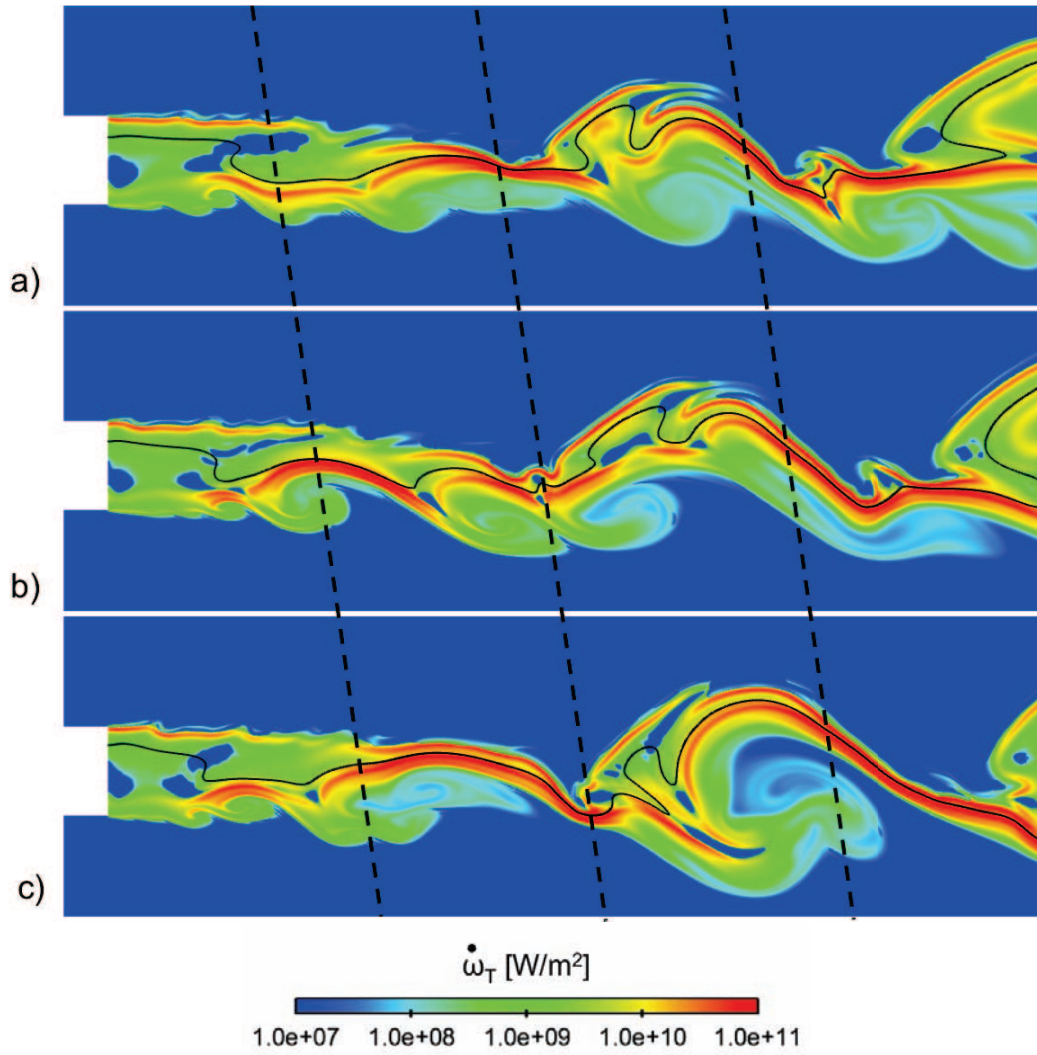


FIGURE 5.17 - Evolution du champ de dégagement de chaleur et de la ligne de stœchiométrique dans le cas LES sans modèle à $t = 0,025ms$ a), $t = 0,050ms$ b) et $t = 0,075ms$ c).

5.7.4 Résultats pour l'épaississement des flammes non-prémélangées

On applique maintenant l'épaississement spécifique aux flammes de diffusion calculé précédemment ($F = 1,27$ (5.79)) dans un calcul LES (Fig. 5.19). La forme de la flamme est similaire dans les premiers instant du calcul comparé au calcul LES sans modèle (Fig. 5.17). On note que les zones de dégagement de chaleur sont plus épaisses. La Fig. 5.18 présente l'évolution au cours du temps de l'intégrale sur le domaine du dégagement de chaleur dans les cas de la DNS, LES sans modèle et LES avec modèle. Pour un instant donné, il est rare de trouver le même dégagement de chaleur pour deux calculs différents : les trois courbes évoluent différemment. Il est donc difficile de conclure quant à l'influence du modèle testé. En terme de moyenne temporelle, le dégagement de chaleur moyen du calcul sur maillage raffiné pour la DNS est plus grand que sur le maillage de la LES, mais on observe que la moyenne temporelle du dégagement de chaleur intégré du calcul LES avec modèle est plus proche de celle du calcul DNS (Tab. 5.3). L'utilisation du modèle permet un dégagement de chaleur moyen bien plus proche de la solution exacte. La flamme obtenue (Fig. 5.19),

calcul	$\langle \int \dot{\omega}_T \rangle$ [W] (temporel)
DNS	339130
LES sans TFLES	304778
LES avec TFLES ($F = 1,27$)	340082

TABLE 5.3 - Comparaison de $\langle \int \dot{\omega}_T \rangle$ sur les calculs DNS et LES sur $\Delta t = 2ms$.

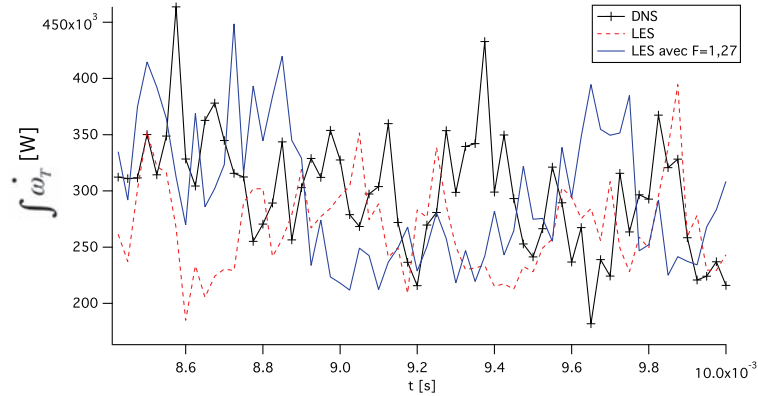


FIGURE 5.18 - Evolution de Ω_T pour le calcul DNS, LES sans modèle TFLES, et LES avec TFLES ($F = 1,27$).

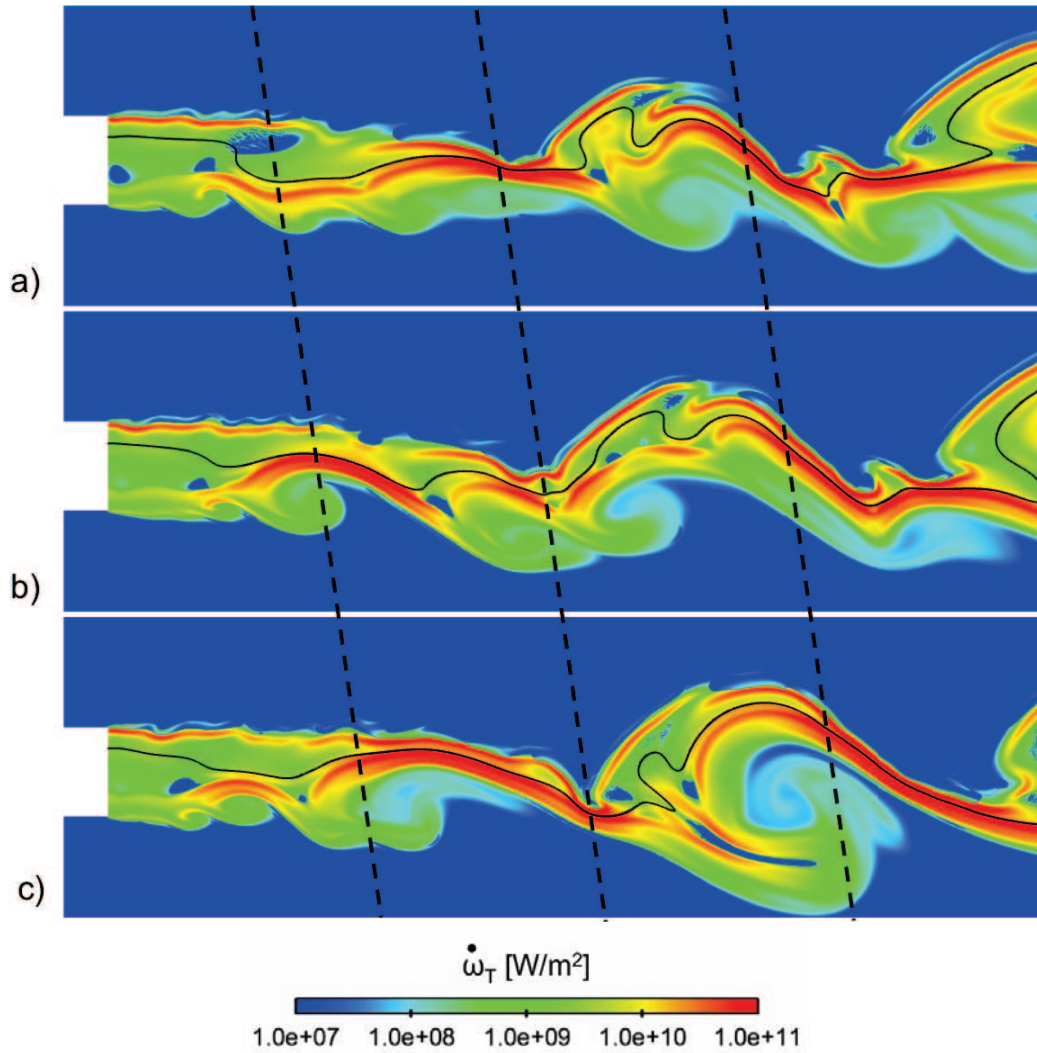


FIGURE 5.19 - Evolution du champ de dégagement de chaleur et de la ligne de stœchiométrie dans le cas LES avec $F = 1,27$ à $t = 0,025ms$ a), $t = 0,050ms$ b) et $t = 0,075ms$ c).

5.7.5 Evaluation de la fonction de plissement

On utilise maintenant à la fois les coefficients F et E définis à la Sec. 5.7.3 ((5.79) et (5.80)), en les appliquant dans un calcul LES. Les champs instantanés étant différents d'un calcul à l'autre, on représente sur la Fig. 5.21 l'intégrale de Ω_T au cours du temps pour les calculs DNS, LES sans modèle, LES avec $F = 1,27$ et LES avec $F = 1,27$ et $E = 1,1232$. On constate que les résultats

obtenus en utilisant un modèle sont meilleurs que le calcul sans modèle. Le calcul utilisant F et E semble être plus régulier au cours du temps dans le dégagement de chaleur. Les résultats obtenus en terme de moyenne temporelle du dégagement de chaleur intégré sur le domaine (Tab. 5.4) montrent que le cas où l'on utilise F et E donne effectivement de meilleurs résultats que sans E ou sans modèle. La composante basée sur le plissement apporte bien une amélioration aux résultats du modèle de flamme non-prémélangée.

Une configuration de Turbulence Homogène Isotrope a été étudiée par la suite afin de vérifier la validité du modèle de fonction d'efficacité en prémélangée [Colin et al., 2000] dans le cas des flammes non-prémélangées. Cependant, le manque de temps pour développer une méthode de filtrage spatial n'a pas permis d'exploiter ces résultats.

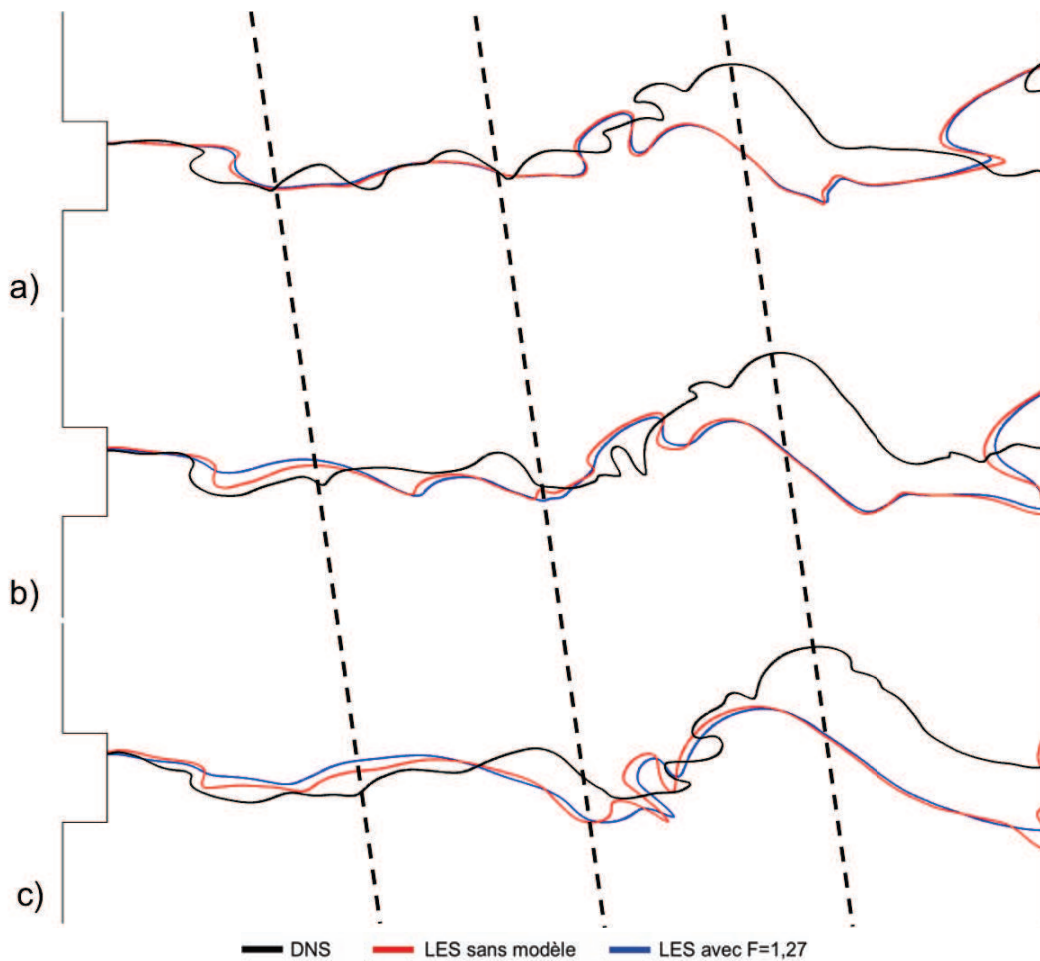


FIGURE 5.20 - Evolution de la ligne stœchiométrique pour les calculs DNS (noir), LES sans modèle (rouge) et LES avec modèle (bleue) à $t = 0,025ms$ a), $t = 0,050ms$ b) et $t = 0,075ms$ c).

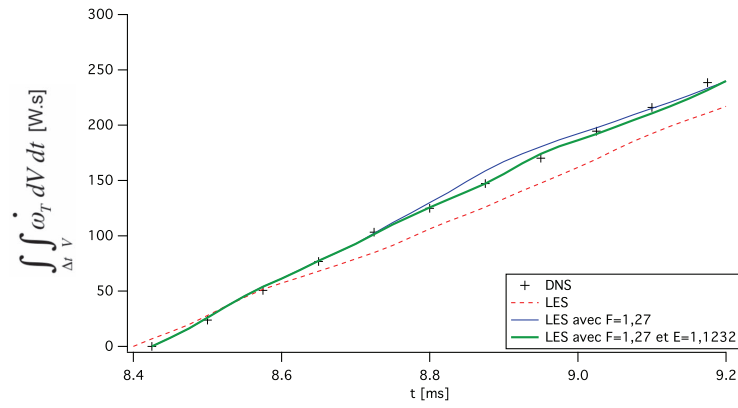


FIGURE 5.21 - Evolution de l'intégrale de Ω_T au cours du temps pour le calcul DNS, LES sans modèle TFLES, LES avec TFLES ($F = 1, 27$ (5.79)) et LES avec TFLES ($F = 1, 27$ (5.79)) et efficacité ($E = 1, 1232$ (5.80)).

calcul	F	E	$\langle \int \dot{\omega}_T \rangle$ [W] (temporel)
DNS	-	-	313470
LES sans TFLES	-	-	271290
LES avec TFLES	1, 27	-	308228
LES avec TFLES et Efficacité	1, 27	1, 1232	310319

TABLE 5.4 - Comparaison de $\langle \int \dot{\omega}_T \rangle$ sur les calculs DNS et LES sur $\Delta t = 1, 2ms$.

5.8 Conclusion

Le modèle de flamme turbulente non-prémélangée TFLES est constitué de deux étapes :

- l'utilisation d'un rapport d'échelle F pour modéliser la combustion due aux structures turbulentes non résolues.

$$F = \sqrt{\frac{\chi_K}{\chi_{cut}}} = \sqrt{\frac{\Delta_x u'_{\Delta_x}}{\nu}} \quad (5.81)$$

- l'utilisation d'une fonction d'efficacité E pour modéliser le plissement de sous-maille.

$$E = \frac{\Xi(LES)}{\Xi(K)} \simeq \frac{1 + \alpha F^2}{1 + \alpha} \quad (5.82)$$

De plus, dans le cas d'une chimie très rapide, on associe aux étapes précédentes le concept de flamme ralentie. En résumé, pour inclure la combustion de sous-maille avec le plissement, le modèle peut s'écrire :

$$l_{cut} > \eta_k \implies \begin{cases} A^* &= A \\ D^* &= DF \times E^2 \end{cases} \implies \Omega_{tot}^* = \Omega_{tot,LES} \times F \times E = \Omega_{tot} \quad (5.83)$$

$$(5.84)$$

Et lorsque :

$$\tau_c < \Delta t_{CFL} \implies \begin{cases} A^* &= A/S \\ D^* &= DF \times E^2 \end{cases} \implies \Omega_{tot}^* = \Omega_{tot,LES} \times F \times E = \Omega_{tot} \quad (5.85)$$

$$(5.86)$$

Ces premiers résultats sont très encourageants et doivent être confirmés par des calculs DNS plus avancés, permettant un filtrage pour une évaluation a priori des différentes hypothèses et formulations.

Identification du régime de combustion dans les flammes turbulentes partiellement prémélangées

Sommaire

3.1	Introduction	76
3.2	Généralités sur la combustion	76
3.3	Equations conservatives	79
3.3.1	La phase gazeuse	79
3.3.2	La phase liquide	80
3.4	Notions de turbulence	83
3.4.1	Le cas 3D	84
3.4.2	Le cas 2D	85
3.4.3	Coût d'un calcul turbulent	86
3.5	Différentes approches pour la simulation de la turbulence	86
3.6	Le code AVBP et les équations de la LES	87
3.6.1	Principe de la LES	88
3.6.2	Modélisation de la phase gazeuse	89
3.6.3	Modélisation de la phase liquide	90
3.7	Le code CANTERA	91

6.1 Introduction

Les cas académiques de flammes simples distinguent les flammes prémélangées des flammes non-prémélangées et servent de bases pour établir les modèles de combustion. Dans les configurations turbulentes où les réactifs sont initialement séparés, on assiste à une répartition des zones de réaction donnant lieu à une proximité des flammes prémélangées et de diffusion, où les gaz préchauffés ou brûlés de l'une peuvent devenir les réactifs de l'autre [Vervisch and Poinso, 1998]. Cette situation est appelée régime partiellement prémélangé. Yamashita et al. [Yamashita et al., 1996] propose dans son étude d'un jet non-prémélangé réactif l'utilisation d'un indice de flamme ζ (indice de Takeno) permettant de distinguer a posteriori les régimes de flamme en fonction du sens de variation du combustible par rapport à celui de l'oxydant. Ces premiers travaux ont été effectués avec une cinétique chimique à une étape. Par la suite, une étude de Fiorina et al. [Fiorina et al., 2005] a démontré que dans un cas particulier, le modèle FPI étendu aux flammes non-prémélangées ne pouvait se contenter d'utiliser ζ pour résoudre correctement la configuration. Cette remarque a fait l'objet d'une adaptation du concept par Knudsen et Pitsch [Knudsen and Pitsch, 2009] pour le modèle FVP de Moin et Pierce [Pierce, 2001, Pierce and Moin, 2004] étendu par Ihme [Ihme et al., 2005, Ihme, 2007]. On s'intéresse dans ce chapitre à la configuration de Fiorina et al. [Fiorina et al., 2005] pour évaluer les limites de l'utilisation de ζ dans le cas d'un schéma cinétique à plusieurs étapes dans l'optique d'une utilisation active avec le modèle de flamme épaissie en prémélange et en diffusion.

6.2 Configuration d'étude

On se place dans la configuration décrite dans Fiorina et al. [Fiorina et al., 2005]. Pour cela, on utilise le domaine de calcul décrit au paragraphe 4.4.5.1 pour étudier les écoulements stationnaires à contre-courant. On distinguera les deux entrées du domaine par les lettres "a" et "b". On reprend les relations énoncées à la section 4.4.5.1 pour établir une zone réactive au centre du domaine (Eq. (6.2)) et définir une valeur de l'étirement (Eq. 6.1).

$$a = \frac{|U_a| + |U_b|}{d} \quad (6.1)$$

$$\rho_a U_a = \rho_b U_b \quad (6.2)$$

On modifie la composition de l'injection par rapport au paragraphe 4.4.5.1 pour définir deux nouvelles configurations décrites dans le Tab. 6.1 et représentées sur la Fig. 6.1. La configuration NP représente la configuration classique présentée précédemment (cf. Sec. 4.4.5.1). Dans la configuration NP-P, l'injection d'oxygène est remplacée par un mélange pauvre H_2/O_2 ¹. Ceci crée une flamme de prémélange (flamme P) du côté de cette entrée, et une flamme de diffusion

1. Dans Fiorina et al. [Fiorina et al., 2005], un écoulement d'air est confronté à un écoulement riche en méthane.

Configuration	Composition entrée "a"	Composition entrée "b"
NP (Sec. 4.4.5.1)	$Y_{H_2} = 1$	$Y_{O_2} = 1$
NP-P	$Y_{H_2} = 1$	$Y_{O_2} = 0,9815$ $Y_{H_2} = 0,0185 (\Phi = 0,15)$
P-P	$Y_{O_2} = 0,9815$ $Y_{H_2} = 0,0185 (\Phi = 0,15)$	$Y_{O_2} = 0,9815$ $Y_{H_2} = 0,0185 (\Phi = 0,15)$

TABLE 6.1 - Récapitulatif des configurations à contre-courant étudiées (P :Prémélangé, NP :Non-Prémélangé).

(flamme NP) du côté de l'entrée d'hydrogène pur (Fig. 6.1). La configuration P-P remplace les deux injections par le mélange pauvre H_2/O_2 , créant ainsi deux flammes prémélangées. L'intérêt de la configuration P-P est de créer une flamme prémélangée étirée comme dans le cas NP-P. Dans les deux cas NP-P et P-P, l'augmentation des débits augmente l'étirement et rapproche les deux zones de réaction. La chimie H2-12s est utilisée pour toute cette étude réalisée avec CANTERA. La richesse du prémélange est choisie à $\Phi = 0,15$ pour que la vitesse de flamme prémélangée soit faible. Le mélange choisi étant moins dense que l'oxygène pur ($\rho_{O_2}/\rho_{\Phi=0,15} = 1,276$), les vitesses d'injection seront recalculées pour chacune des configurations NP, NP-P et P-P pour les comparer au même étirement a (Eq. 6.1).

On utilise l'indice de Takeno [Yamashita et al., 1996] normalisé (noté ζ) défini par Eq. (6.3), qui prend la valeur 1 pour les flammes de prémélange et -1 pour les flammes de diffusion. On trouvera dans la littérature des modifications de cette définition pour restreindre sa valeur entre 0 et 1 [Domingo et al., 2002]. Il est important de noter que cet indice étant basé sur les gradients d'espèces, **ζ n'est pertinent que dans les zones réactives**. En effet, de légères variations d'ordre numérique (dans les zones où les profils doivent rester constants) peuvent modifier la valeur de cet indice, sans que cela ne soit significatif.

$$\zeta = \frac{\nabla Y_{O_2} \bullet \nabla Y_{H_2}}{|\nabla Y_{O_2} \bullet \nabla Y_{H_2}|} \quad (6.3)$$

6.3 Résultats des comparaisons entre les configurations NP-P, NP et P-P

Afin de pouvoir disposer d'un élément de comparaison, on rappelle la structure d'une flamme laminaire prémélangée à la richesse $\phi = 0,15$ (Fig. 6.2). Les grandeurs représentées seront utilisées

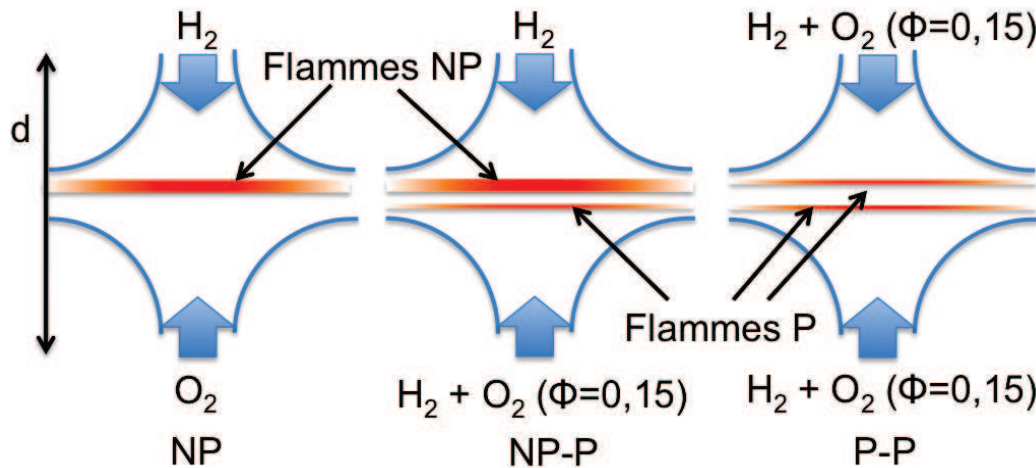


FIGURE 6.1 - Configuration d'écoulement à contre-courant NP (gauche), NP-P (milieu) et P-P (droite)

dans les configurations suivantes. La Fig. 6.2 présente les profils des taux d'avancement Q_j des différentes réactions (a,b,c), de ω_T et T (d), de Y_{H_2} , Y_{O_2} et ζ (e). La solution présentée est une flamme stationnaire, les gaz frais sont injectés à gauche.

La structure de la zone réactive créée par les configurations à double flamme NP-P et P-P est classée en trois catégories :

- Les deux flammes sont éloignées.
- Les deux flammes sont proches.
- Les deux flammes sont difficilement différenciables.

On détaille par la suite chacune de ces catégories.

6.3.1 Zones de réactions séparées

Les Fig. 6.3 et Fig.6.4 présentent la structure de flamme pour $a = 5000/s$ et $a = 12000/s$ de la configuration NP-P. Les produits de combustion de la flamme P alimentent, côté oxydant, la flamme NP. Les fractions massiques Y_{O_2} et Y_{H_2} présentent une zone de plus faible variation entre les zones de réaction, qui rétrécit avec l'augmentation de l'étirement et rapproche les deux zones de réactives. Dans le cas $a = 12000/s$ (Fig.6.4), cette zone est très petite. Ce régime est caractérisé par la valeur du minimum de Y_{H_2} dans cette zone : $Y_{H_2,min} \approx 0$. Le taux de dégagement de chaleur ω_T ne s'annule pas dans cette zone mais connaît un minimum local. Ceci est dû aux réactions qui continuent de dissocier l'oxygène dans les produits de la flamme de pré-mélange de la même manière que pour la flamme P (Fig. 6.2d). Pour la suite de l'étude, on appellera cette zone "ZRM"

(Zone de Réaction Minimale). On arrive à identifier aisément les deux régimes de combustion avec l'indice de Takeno.

La Fig. 6.5 présente les profils des même grandeurs dans une configuration P-P à $a = 12000/s$. La structure est semblable à celle de la configuration NP-P lorsque $\zeta = 1$. On constate que l'éirement appliqué à la flamme de prémélange augmente son maximum de $\dot{\omega}_T$, que ce soit dans les configurations NP-P (Fig. 6.3 d et 6.3 d) ou P-P (Fig. 6.3d), par rapport à celui de la flamme laminaire simple (Fig. 6.2 d).

6.3.2 Zones de réactions proches

Lorsque l'on augmente l'éirement ($a = 40000/s$ sur la Fig. 6.6), la courbe de Y_{O_2} ne permet plus de distinguer les deux zones de réaction, mais le profil de Y_{H_2} connaît encore un minimum. La ZRM présente des minima locaux pour certaines réactions comme Q_1 et Q_3 (Fig.6.6a) qui sont non négligeables. Cependant, grâce au profil de H_2 , ζ caractérise toujours correctement la région de prémélange. Le changement de signe se fait une fois de plus entre la ZRM et le pic de réaction de la flamme de prémélange. La Fig. 6.7 permet de comparer le comportement de la flamme prémélangée étirée dans la configuration P-P. Le profil de Y_{O_2} ne montre plus de plateau au centre comme sur la Fig. 6.5 e).

6.3.3 Zone de réaction unique

Lorsque l'on augmente encore l'éirement ($a = 10^5/s$ sur la Fig. 6.8), on obtient une structure de flamme différente des résultats présentés précédemment en configuration NP-P. On ne peut plus distinguer les deux flammes. La structure est très similaire à celle d'une configuration NP (Fig. 6.9) car le prémélange injecté en b se confond avec le prémélange au sein de la flamme de diffusion. On observe juste un regain de combustion côté b par rapport au cas NP, alimenté par l' H_2 injecté. ζ n'indique plus de zone de flamme de prémélange et la flamme sera traitée comme une flamme de diffusion. La différence entre la configuration NP et NP-P se voit sur le côté droit de la flamme (côté oxydant), avec un surcroît de réaction pour la configuration NP-P. La Fig. 6.10 présente des diagrammes de la température en fonction de la fraction de mélange z_H pour $a = 80000$ (c et d) et $a = 100000/s$ (a et b) dans le cas NP-P. Ces diagrammes sont colorés en fonction de ζ . Dans le cas $a = 100000$ (a), la courbe est entièrement bleue ($\zeta < 0$) et la forme correspond à celle d'une flamme de diffusion. Un zoom sur la partie pauvre (b) ne montre pas plusieurs valeurs de T pour une même valeur de z_H . Dans le cas $a = 80000/s$ (c), la partie pauvre indique bien une flamme de prémélange. Un zoom sur cette partie pauvre (d) montre qu'une partie de la courbe donne deux valeurs de T pour une même valeur de z_H . Il est donc raisonnable de considérer la configuration NP-P avec $a = 100000/s$ comme une flamme de diffusion.

6.4 Perspective d'utilisation

La capacité de l'indice de Takeno à distinguer les régimes de combustion peut permettre d'appliquer un modèle adapté pour chaque régime de combustion. Dans un premier temps, on se contentera de n'appliquer le modèle TFLES qu'aux flammes dont $\zeta > 0$. A partir du modèle DTFLES décrit à la section 5.3, on modifie l'expression du senseur de flamme par :

$$\mathcal{S}_{\text{Takeno}} = \mathcal{S} \times \max(\zeta, 0) \quad (6.4)$$

ce qui modifie la relation 5.28 définissant le coefficient d'épaississement.

$$F = 1 + (F_{\max} - 1)\mathcal{S}_{\text{Takeno}} = 1 + (F_{\max} - 1)\mathcal{S} \times \max(\zeta, 0) \quad (6.5)$$

6.5 Conclusion

Cette étude confirme que ζ est bien utilisable pour la localisation des différents régimes de combustion dans les configurations partiellement prémélangées. On note que la configuration NP-P avec un mélange très pauvre tend vers une structure de flamme de diffusion lorsque l'on augmente l'étirement. Il serait intéressant de poursuivre cette étude dans le cas d'une flamme laminaire prémélangée diphasique où du liquide continue de s'évaporer au travers et en aval de la flamme, pour éventuellement en créer une seconde, comme dans les régimes de combustion de groupes et de combustion hybrides [Réveillon and Vervisch, 2005].

Les résultats de cette étude nous permettent pour l'instant d'utiliser l'indice de Takeno pour identifier les régimes de flamme et leur appliquer le modèle de flamme épaissie adapté.

Pour la suite, cet indice sera utilisé afin de n'appliquer le modèle DTFLES qu'aux flammes identifiées comme étant des flammes prémélangées. Le senseur qui détecte la présence de la flamme sera donc multiplié par $\max(\zeta, 0)$.

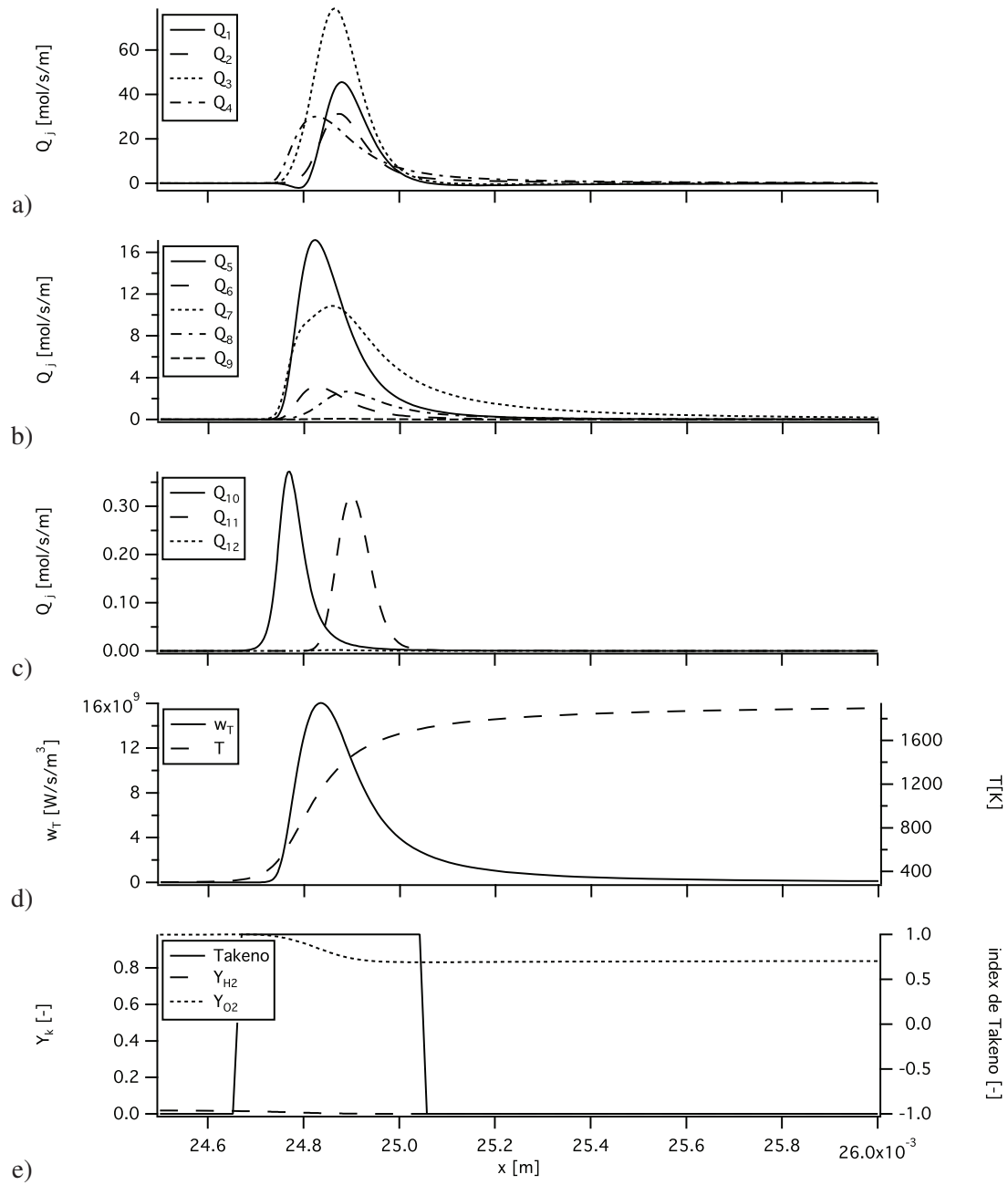


FIGURE 6.2 - Profils des taux de réaction nets des réactions 1 à 4 a), 5 à 9 b), 10 à 12 c), de w_T et T d), de Y_{H_2} , Y_{O_2} et l'indice de Takeno ζ e) pour une flamme P à $\Phi = 0,15$.

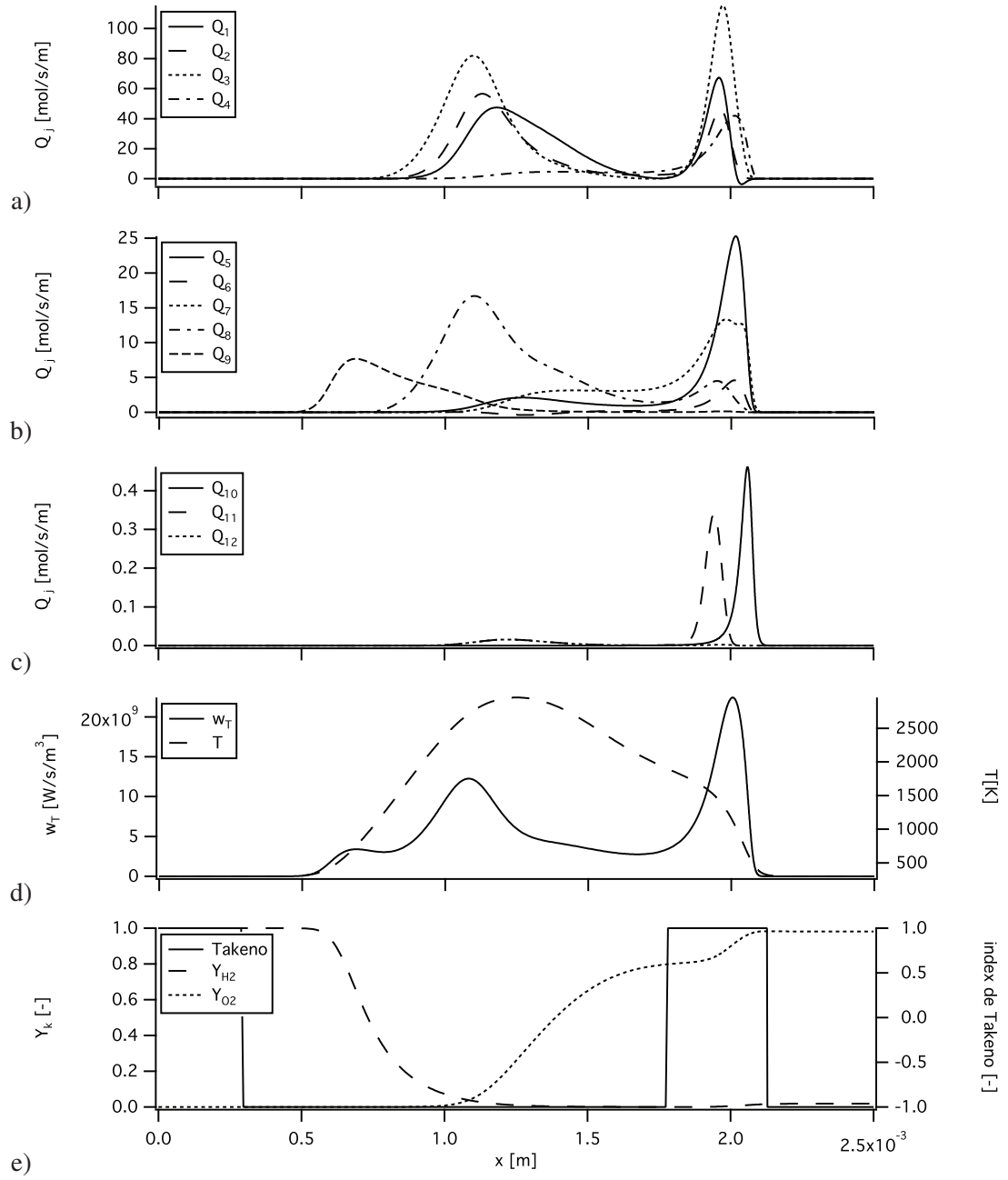


FIGURE 6.3 - Profils des taux de réaction nets des réactions 1 à 4 a), 5 à 9 b), 10 à 12 c), de w_T et T d), de Y_{H_2} , Y_{O_2} et indice de Takeno ζ e) pour la configuration NP-P à l'étirement $a = 5000/s$, entrée "a" à gauche, entrée "b" à droite.

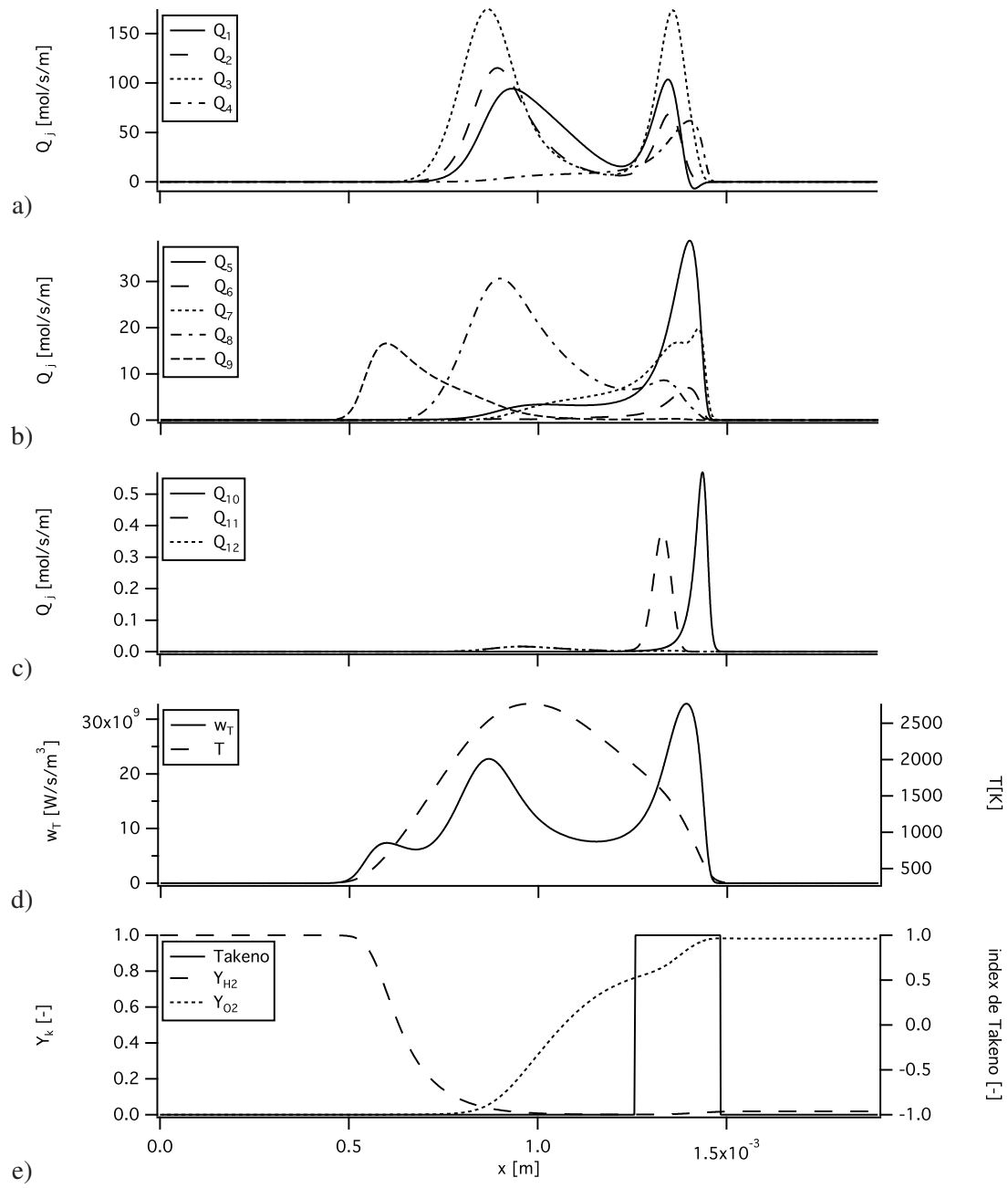


FIGURE 6.4 - Profils des taux de réaction nets des réactions 1 à 4 a), 5 à 9 b), 10 à 12 c), de w_T et T d), de Y_{H_2} , Y_{O_2} et indice de Takeno ζ e) pour la configuration **NP-P** à l'étirement $a = 12000/s$, entrée "a" à gauche, entrée "b" à droite.

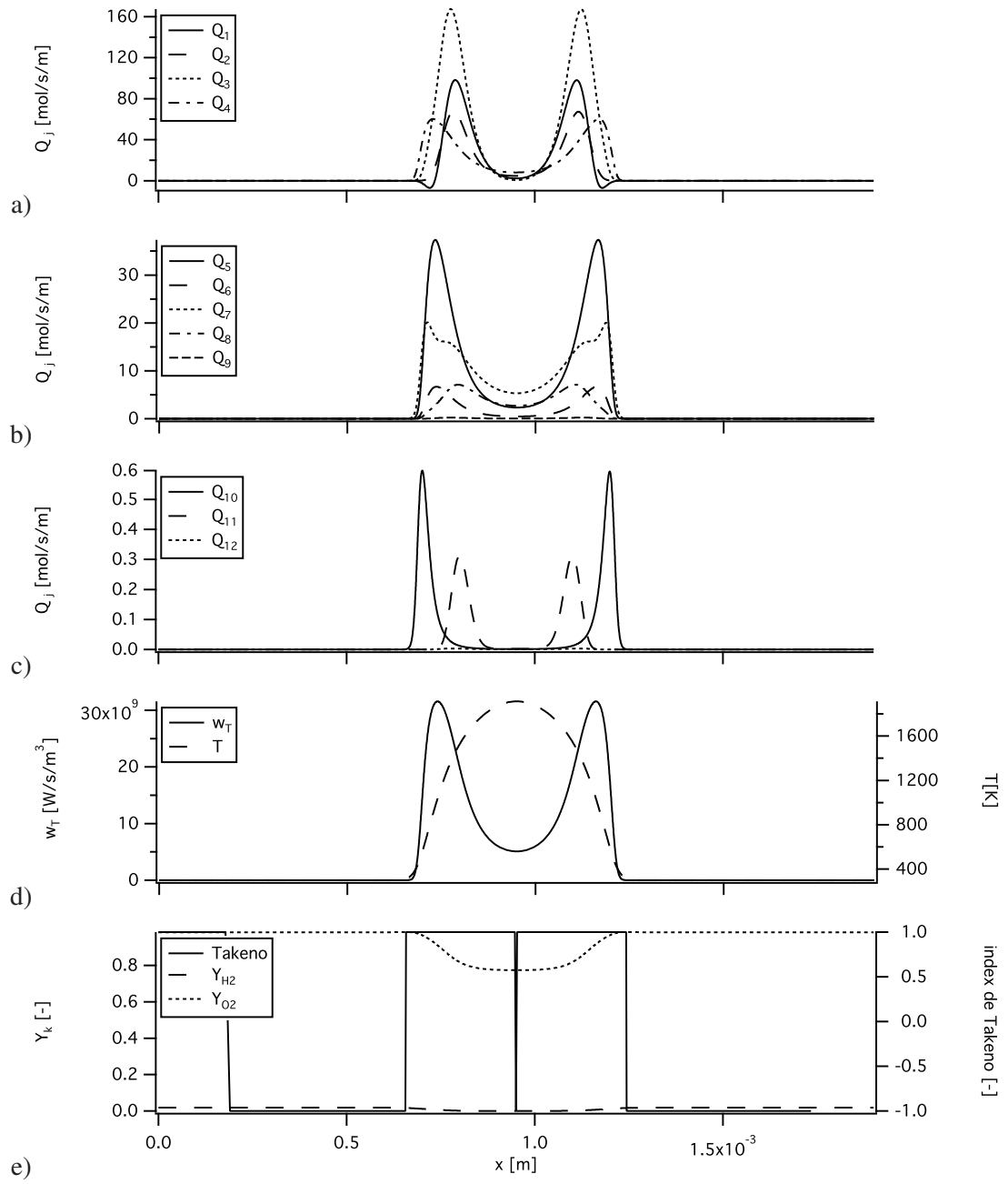


FIGURE 6.5 - Profils des taux de réaction nets des réactions 1 à 4 a), 5 à 9 b), 10 à 12 c), de w_T et T d), de Y_{H_2} , Y_{O_2} et indice de Takeno ζ e) pour la configuration **P-P** à l'étirement $a = 12000/s$, entrée "a" à gauche, entrée "b" à droite.

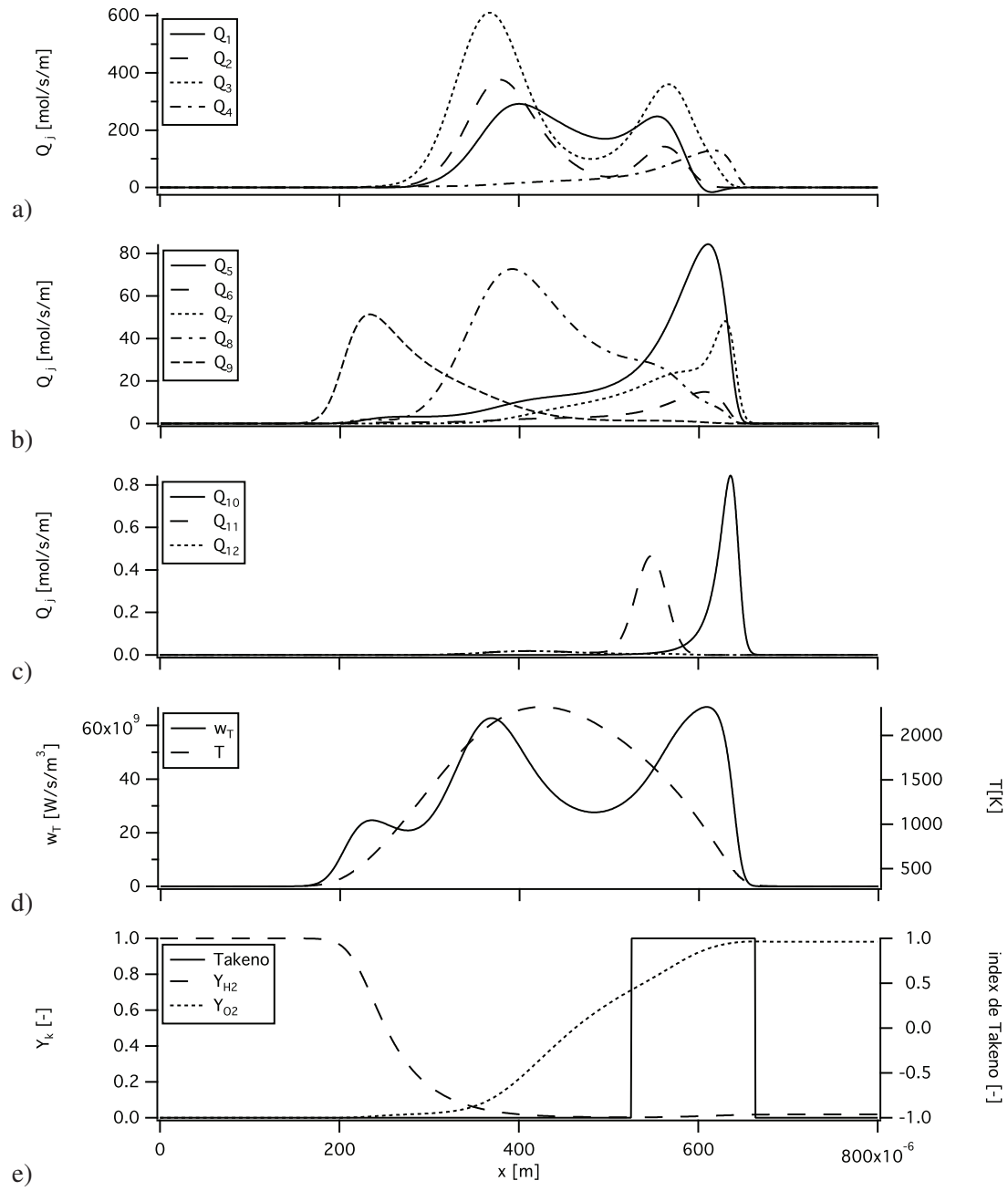


FIGURE 6.6 - Profils des taux de réaction nets des réactions 1 à 4 a), 5 à 9 b), 10 à 12 c), de w_T et T d), de Y_{H_2} , Y_{O_2} et indice de Takeno ζ e) pour la configuration **NP-P** à l'étirement $a = 40000/s$, entrée "a" à gauche, entrée "b" à droite.

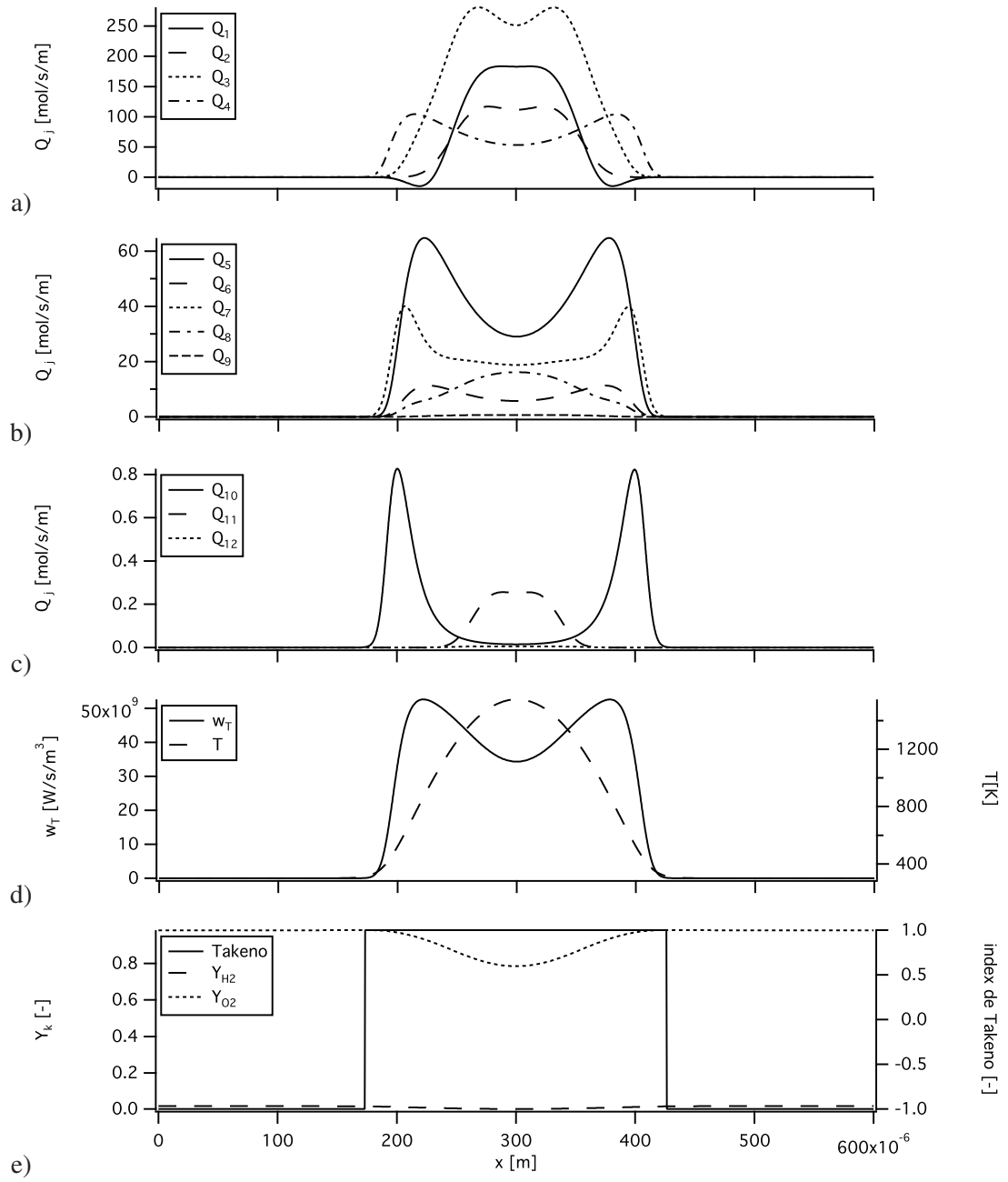


FIGURE 6.7 - Profils des taux de réaction nets des réactions 1 à 4 a), 5 à 9 b), 10 à 12 c), de w_T et T d), de Y_{H_2} , Y_{O_2} et indice de Takeno ζ e) pour la configuration **P-P** à l'étirement $a = 40000/s$, entrée "a" à gauche, entrée "b" à droite.

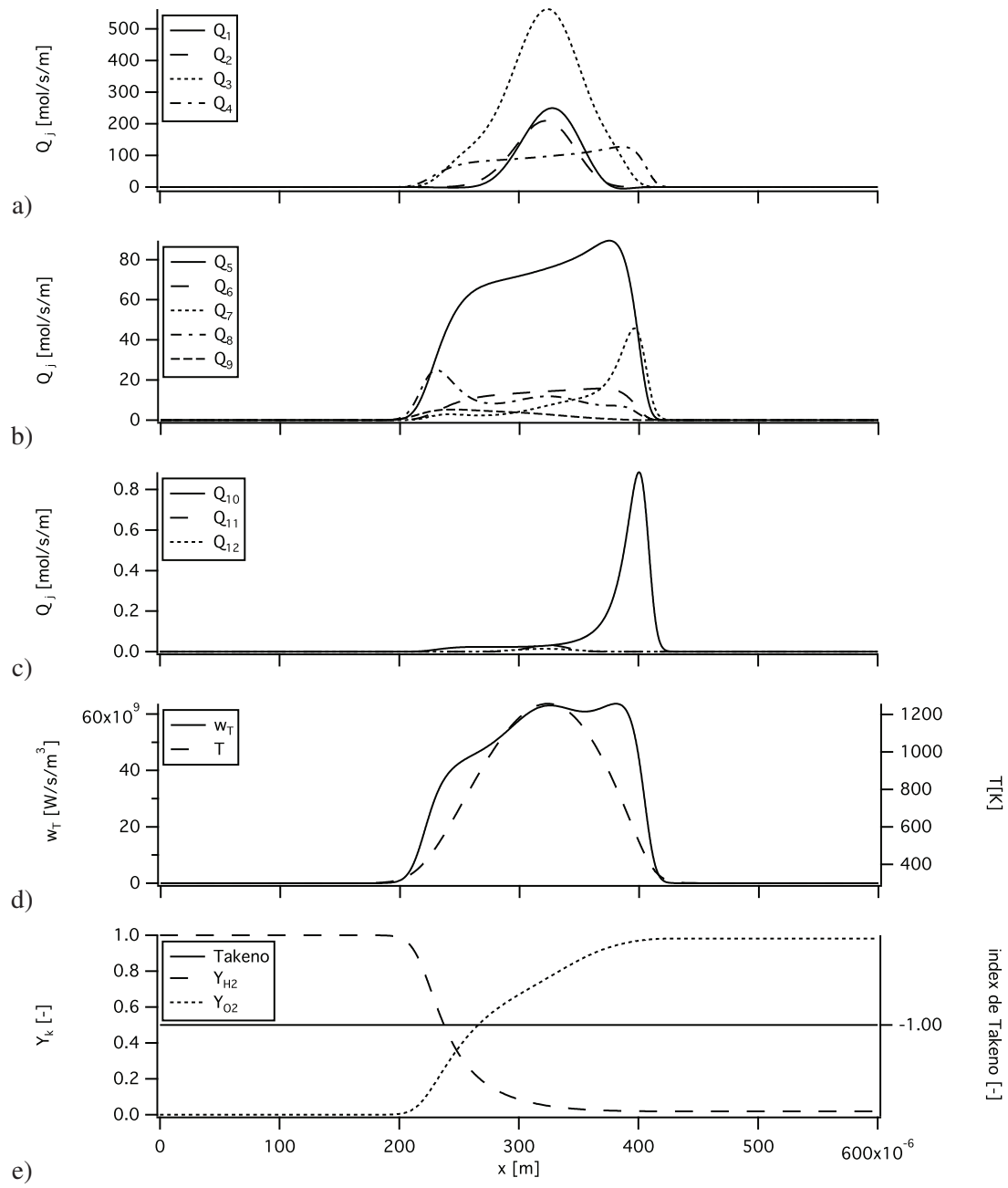


FIGURE 6.8 - Profils des taux de réaction nets des réactions 1 à 4 a), 5 à 9 b), 10 à 12 c), de w_T et T d), de Y_{H_2} , Y_{O_2} et indice de Takeno ζ e) pour la configuration NP-P à l'étirement $a = 100000/s$, entrée "a" à gauche, entrée "b" à droite.

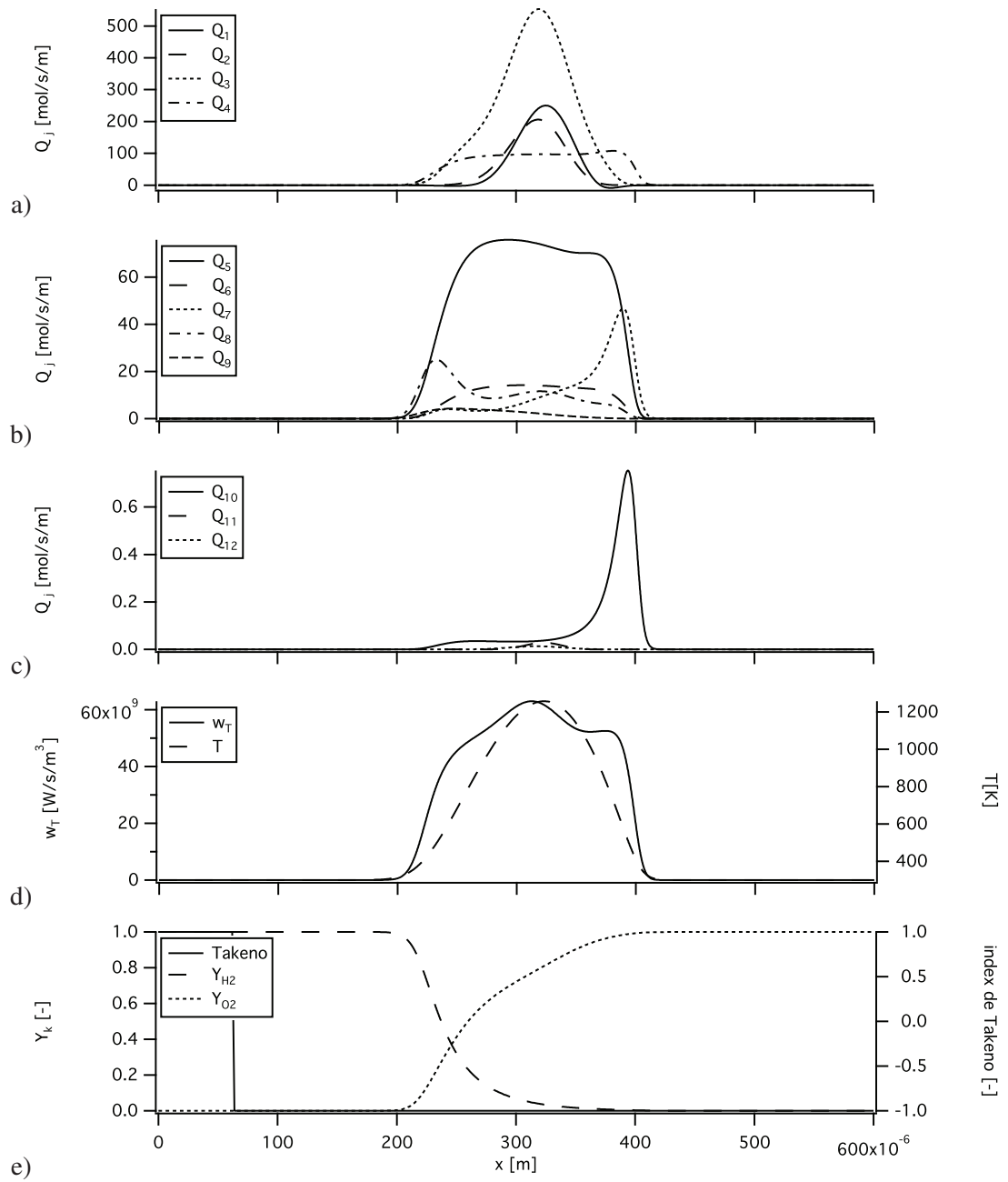


FIGURE 6.9 - Profils des taux de réaction nets des réactions 1 à 4 a), 5 à 9 b), 10 à 12 c), de w_T et T d), de Y_{H_2} , Y_{O_2} et indice de Takeno ζ e) pour la configuration **NP** à l'étirement $a = 100000/s$, entrée "a" à gauche, entrée "b" à droite.

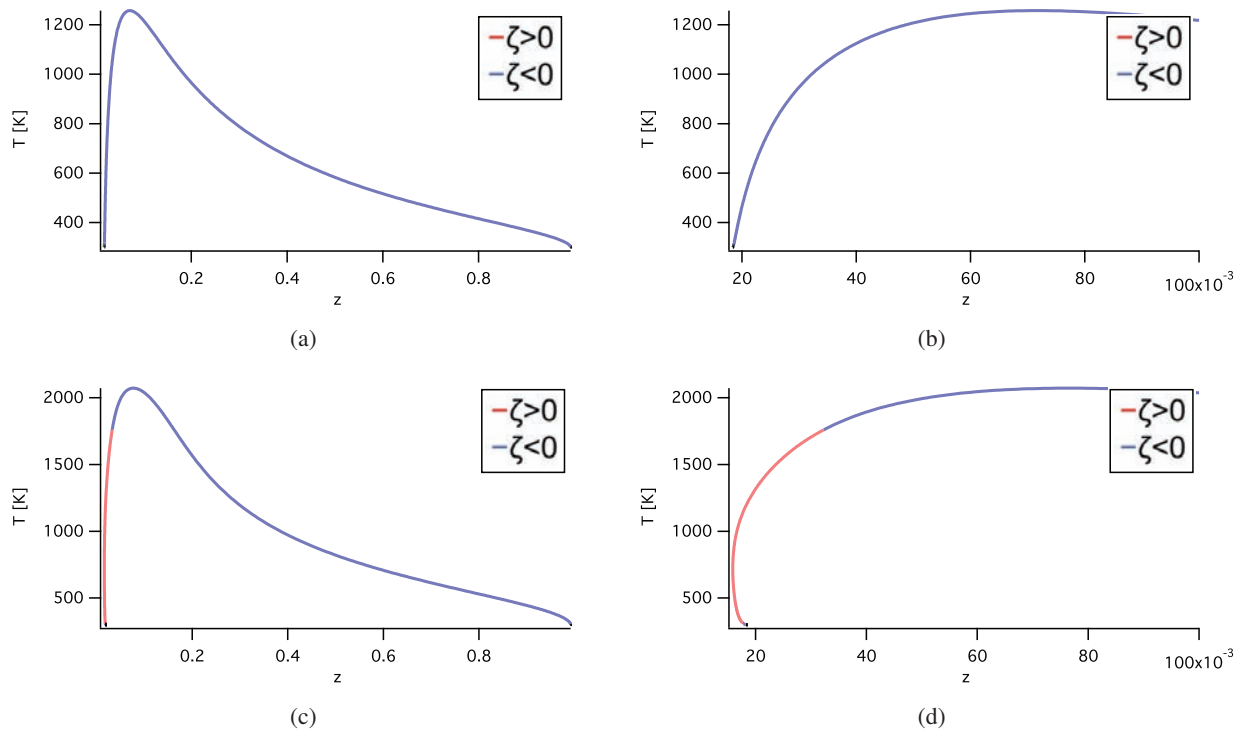


FIGURE 6.10 - Représentation de la température dans l'espace des fractions de mélange pour $a = 10^5/s$ (a et b) et $a = 8.10^4/s$ (c et d) pour la configuration **NP-P**.

Conclusion partielle

Dans cette partie, une attention particulière a été portée sur différents aspects de la modélisation de la combustion du couple H_2/O_2 . Une étude de la modélisation de la cinétique a comparé plusieurs schémas cinétiques. De part ses résultats satisfaisants en terme de vitesse de flamme laminaire ou de température de gaz brûlés (régime prémélangé et non-prémélangé), et par son faible coût en terme de temps de calcul et de mémoire, la cinétique de Boivin à trois étapes [Boivin, 2011] (Chap. 4), initialement développée pour la combustion H_2/Air , a été retenue.

Puis, une étude visant à compléter le modèle TFLES (Chap. 5) a été menée pour traiter les flammes non-prémélangées. À partir de solutions analytiques, une méthode de traitement a été développée en trois étapes :

- Le traitement de la combustion induite par l'étirement non résolu en sous-maille.
- Le traitement du plissement non résolu en sous-maille.

L'utilisation de cette méthode sur des cas simples a permis une première validation du modèle. Pour finir, une étude liée à la distinction des régimes prémélangés et non-prémélangés (Chap. 6) a permis de justifier l'utilisation de l'indice de Takeno pour différencier deux régimes de bases de la combustion.

Troisième partie

Allumage 3D dans une chambre réduite de moteur fusée [CONFIDENTIEL]

Introduction

La combustion dans les moteurs fusées cryotechniques implique la mise en jeu de nombreux phénomènes physiques. Cependant, ce type de moteur étant peu accessible pour des études ou des mesures, de nombreux travaux ont été effectués sur des configurations simplifiées pour définir les propriétés et les paramètres essentiels permettant de caractériser ces phénomènes.

On se propose donc d'effectuer un calcul représentatif d'une chambre de combustion cryotechnique au cours d'une séquence d'allumage simplifiée. Après avoir présenté la mise en place du calcul, le Chap. 7 donnera une vue globale du résultat par une description chronologique des événements à priori visibles ainsi qu'une analyse temporelle de grandeurs globales. Puis, le Chap. 8 et le Chap. 9 procéderont respectivement à une analyse plus détaillée des différents régimes de combustion et des différents modes de propagation.

On notera que les exemples d'études numériques similaires dans la littérature sont rares.

Calcul 3D d'allumage rapide

[CONFIDENTIEL]

CHAPITRE 8

Différents régimes de combustion [CONFIDENTIEL]

CHAPITRE 9

Mécanismes de propagation de flamme [CONFIDENTIEL]

Conclusion partielle

L'objectif de cette partie était de calculer une séquence d'allumage dans une chambre de combustion de type moteur fusée cryotechnique.

Le Chap. 7 a présenté le calcul de manière globale, des différents choix effectués pour la mise en place à la description chronologique des résultats obtenus. Cette description a été divisée en trois parties (la mise en route de l'allumeur, la mise en route de l'injection de H_2 des injecteurs coaxiaux et la mise en route de l'injection de LOx) qui ont permis de dégager deux axes d'étude de ce calcul :

- les différents régimes de combustion.
- les différents modes de propagation.

Ces deux axes de recherche ont fait l'objet respectivement du Chap. 8 et du Chap. 9. De plus, une analyse de plusieurs quantités intégrées sur le domaine au cours du temps a permis de rappeler les nombreuses difficultés numériques rencontrées lors de ce calcul, dues à l'aspect multi-physique du problème.

Conclusion générale et perspectives

Bien qu'anticipée depuis plusieurs années, l'arrivée de nouveaux concurrents sur le marché des lanceurs spatiaux crée un climat de tension économique. Ces tensions poussent à l'utilisation de technologies plus complexes qui auront pour but de conserver la fiabilité de ces lanceurs tout en améliorant leurs performances. Fort de ses 59 lancements consécutifs réussis, l'Europe mise aujourd'hui sur le moteur Vinci pour améliorer la capacité de ses lanceurs Ariane 5 et 6. Cette technologie étant la pièce centrale des lanceurs de demain, une campagne d'études approfondies est en cours afin d'assurer les capacités annoncées. Dans ce contexte de recherche et de développement industriel, l'objectif général de cette thèse a été d'améliorer la compréhension du transitoire d'allumage d'une chambre de combustion cryotechnique H_2/LOx par l'utilisation de la simulation aux grandes échelles. Pour faire face à une problématique multi-échelle, une stratégie d'étude en deux parties a été menée afin d'investiguer les aspects microscopiques et macroscopiques liés à la combustion lors de la phase d'allumage.

La première partie de ces travaux s'est concentrée sur la modélisation de la combustion turbulente. Après avoir écrit les équations réactives de la LES dans le Chap. 3, une première étude a été menée sur le choix d'une cinétique chimique adaptée (Chap. 4). L'objectif principal de cette étude a été de trouver et de valider les caractéristiques d'une cinétique chimique réduite, permettant d'envisager un calcul 3D réactif lourd sur 264 processeurs. Avoir comparé les mécanismes réactionnels H2-GL7, H2-12s et H2-3s, la cinétique à trois étapes H2-3s de Boivin, obtenue par l'Approximation des Etats Quasi-Stationnaires, a été retenue. Initialement développées pour des cas H_2/Air , les cinétiques H2-3S et H2-12s ont été validées pour des configurations H_2/O_2 . Une fois le modèle cinétique défini, le Chap. 5 s'est intéressé à la définition d'un modèle de combustion turbulente. L'intérêt de cette étude a été de trouver une méthode adaptée au traitement des régimes non-prémélangés, tout en restant proche et "compatible" avec le modèle TFLES déjà utilisé pour les régimes prémélangés. L'étude des propriétés des flammes de diffusion a permis de développer une méthode en deux temps :

- Dans un premier temps, le modèle dit d'*épaississement* a présenté deux étapes à la manière du modèle TFLES. Une première étape vise à compenser l'étirement non-résolu par le calcul LES en comparant les étirements résolus en LES et en DNS. La deuxième étape quant à elle vise à compenser le plissement non résolu par le maillage LES.
- Dans un deuxième temps, un modèle de *ralentissement* de flamme a justifié le ralentissement d'une cinétique chimique très rapide dans certaines conditions, afin que le pas de temps chimique ne soit pas une contrainte.

Grâce à une méthode de validation a posteriori, une configuration de couche de mélange a permis d'obtenir de bons résultats avec cette méthodologie. Une étude 3D plus avancée permettant une évaluation a priori des différentes hypothèses et formulations pourra être envisagée pour la suite. Les problèmes de cinétique chimique et de combustion turbulente étant réglés, la question du senseur permettant de détecter les différents régimes de combustion se pose. Le Chap. 6 s'est attardé sur la validité de l'utilisation de l'indice de Takeno pour distinguer les régimes prémélangés et non-prémélangés dans une configuration de flammes étirées.

Cette première partie a permis de définir les bases à l'échelle microscopique d'un calcul complexe. De plus, une approche simple de type "TFLES" a pu être mise au point pour traiter les flammes non-prémélangées en combustion turbulente. Cette méthodologie pourra être complétée par une étude par filtrage spatial afin d'estimer une fonction adaptée qui décrit localement le plissement et l'étirement de sous-maille.

La deuxième partie de ces travaux a été consacrée à l'étude de l'allumage dans une configuration représentative d'un moteur fusée cryotechnique. Cette partie étant basée sur un calcul 3D réactif lourd, plusieurs études 2D ont été menées au préalable afin de valider les choix de géométrie, de séquence et de point de fonctionnement. Une fois les choix retenus, le Chap. 7 a présenté une vue globale du calcul réactif final. Cette étude a présenté l'évolution des quantités globales du calcul afin de mettre en avant les instants caractéristiques de la séquence pour pouvoir les étudier sous deux angles.

Le Chapitre suivant (Chap. 8) a détaillé les différents régimes de combustion qui apparaissent au cours du calcul. Cette étude a permis de mieux décrire la structure de l'écoulement dans les différentes configurations d'injection retenues pour la séquence, afin de mieux comprendre la localisation et la forme des différentes zones réactives.

Pour finir, le Chap. 9 a étudié l'aspect dynamique du calcul afin de comprendre les causes générant la propagation de flamme. De cette manière, il est possible d'expliquer le lien qui relie chacun des régimes étudiés au chapitre précédent.

Cette deuxième partie a permis d'établir un premier calcul LES complexe d'allumage en configuration moteur cryotechnique. Bien que l'échelle de temps ne soit pas réaliste, un tel calcul n'a encore jamais été réalisé et procure une idée intéressante des phénomènes apparaissant dans une chambre de combustion. Les moyens de calculs et le code AVBP étant en constante évolution, il est aujourd'hui envisageable de représenter une chambre plus grande avec un maillage plus homogène pour chaque injecteur.

La poursuite des travaux présentés dans ce manuscrit a déjà commencé. Une configuration 3D est en cours d'étude par Shumkivan [Shumkivan, 2017] afin de valider des fonctions de sous-maille de plissement et d'épaississement, et seront aussi repris dans les travaux de Poubeau [Poubeau, 2014]. De plus, la phénoménologie de l'allumage est maintenant utilisée pour de nouveaux calculs d'allumage de type moteur fusée (SNECMA).

Liste des références bibliographiques

- [Administration, 2010] Administration, F. A. (2010). Commercial space transportation : 2009 year in review.
- [Administration, 2011] Administration, F. A. (2011). Commercial space transportation : 2010 year in review.
- [Administration, 2012] Administration, F. A. (2012). Commercial space transportation : 2011 year in review.
- [Administration, 2013] Administration, F. A. (2013). Commercial space transportation : 2012 year in review.
- [Agnew and Graiff, 1961] Agnew, J. and Graiff, L. (1961). The pressure dependence of laminar burning velocity by the spherical bomb method. *Combust. Flame* , 5(3) :209–219.
- [Albat et al., 2007] Albat, R., Langel, G., and Haidn, O. (2007). "Antriebsysteme" in Ley, Wittmann, Hallmann (Eds.) "*Handbuch des Raumfahrttechnik*". Hanser Verlag.
- [Alliance,] Alliance, U. L. site internet : [http ://www.ulalaunch.com/](http://www.ulalaunch.com/).
- [Angelberger et al., 1998] Angelberger, C., Veynante, D., Egolfopoulos, F., and Poinso, T. (1998). Large eddy simulations of combustion instabilities in premixed flames. In *Proc. of the Summer Program* , pages 61–82. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ.
- [Arai et al., 1993] Arai, M., Yoshida, H., and Hiroyasu, H. (1993). Ignition process of compound spray combustible mixtures, dynamics of heterogeneous combustion and reacting systems. *Progress in Astronautics and Aeronautics*, 152 :306–316.
- [ASTRIUM,] ASTRIUM. site internet : [http ://cs.astrium.eads.net/sp/launcher-propulsion](http://cs.astrium.eads.net/sp/launcher-propulsion).
- [Astrium,] Astrium. Thrust chamber for vulcain 2 cryogenic main stage rocket engine.
- [AVBP,] AVBP. site internet : www.cerfacs.fr/cfd/avbp_code.php and www.cerfacs.fr/cfd/cfdpublications.html.

LISTE DES RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [Ballal and Lefebvre, 1978] Ballal, D. and Lefebvre, A. H. (1978). Ignition of liquid fuel sprays at subatmospheric pressures. *Combust. Flame* , 31 :115–126.
- [Baurle and Girimaji, 2003] Baurle, R. and Girimaji, S. (2003). Assumed pdf turbulence-chemistry closure with temperature-composition correlations. *Combust. Flame* .
- [Bellan, 2000] Bellan, J. (2000). Supercritical (and subcritical) fluid behavior and modeling : drops, streams, shear and mixing layers, jets and sprays. *Prog. Energy Comb. Sci.* , 26 :329–366.
- [Bigot et al., 2009] Bigot, B., ESCATHA, Y., and COLLET-BILLON, L. (2009). L'enjeu d'une politique européenne de lanceurs : Assurer durablement à l'europe un accès autonome à l'espace. Technical report, La Documentation française.
- [Bilger et al., 2005] Bilger, R., Pope, S., Bray, K., and Driscoll, J. (2005). Paradigms in turbulent combustion research. *Proc. Combust. Inst.* .
- [Bilger, 1988] Bilger, R. W. (1988). The structure of turbulent non premixed flames. In *22nd Symp. (Int.) on Combustion*, pages 475–488. The Combustion Institute, Pittsburgh.
- [Bird et al., 1960] Bird, R. B., Stewart, W. E., and Lighfoot, E. N. (1960). *Transport phenomena*. John Wiley, New York.
- [Bjorklund, 1983] Bjorklund, R. (1983). Very low thrust gaseous oxygen-hydrogen rocket engine ignition technology. In Eggleston, D., editor, *20th JANNAF Combustion Meeting*, volume 1, pages 699–711.
- [Blint, 1986] Blint, R. J. (1986). The relationship of the laminar flame width to flame speed. *Combust. Sci. Tech.* , 49 :79–92.
- [Bodele, 2004] Bodele, E. (2004). *Modélisation et simulation de l'atomisation secondaire et de la vaporisation turbulente. Application à la combustion cryotechnique*. PhD thesis, Université d'Orléans.
- [Boileau, 2007] Boileau, M. (2007). *Simulation aux grandes échelles de l'allumage diphasique des foyers aéronautiques*. Phd thesis, INP Toulouse.
- [Boileau et al., 2008a] Boileau, M., Pascaud, S., Riber, E., Cuenot, B., Gicquel, L., Poinot, T., and Cazalens, M. (2008a). Investigation of two-fluid methods for Large Eddy Simulation of spray combustion in Gas Turbines. *Flow, Turb. and Combustion* , 80(3) :291–321.
- [Boileau et al., 2008b] Boileau, M., Staffelbach, G., Cuenot, B., Poinot, T., and Bérat, C. (2008b). LES of an ignition sequence in a gas turbine engine. *Combust. Flame* , 154(1-2) :2–22.
- [Boivin, 2011] Boivin, P. (2011). *Reduced-Kinetic Mechanisms for Hydrogen and Syngas Combustion including Autoignition*. PhD thesis, Universidad Carlos III de Madrid.
- [Boivin et al., 2012] Boivin, P., Dauplain, A., Jiménez, C., and Cuenot, B. (2012). Simulation of a supersonic hydrogen-air autoignition-stabilized flame using reduced chemistry. *Combust. Flame* , 159(4) :1779–1790.

- [Boivin et al., 2011] Boivin, P., Jimenez, C., Sanchez, A., and Williams, F. A. (2011). An explicit reduced mechanism for h₂-air combustion. *Proc. Combust. Inst.*
- [Borghi, 1988] Borghi, R. (1988). Turbulent combustion modelling. *Prog. Energy Comb. Sci.* , 14(4) :245–292.
- [Bray and Peters, 1994] Bray, K. N. C. and Peters, N. (1994). Laminar flamelets in turbulent flames. In Libby, P. and Williams, F., editors, *Turbulent Reacting Flows*, pages 63–113, London. Academic Press.
- [Butler and O'Rourke, 1977] Butler, T. D. and O'Rourke, P. J. (1977). A numerical method for two-dimensional unsteady reacting flows. *Proc. Combust. Inst.* , 16(1) :1503 – 1515.
- [Candel et al., 1998] Candel, S., Herding, G., Snyder, R., Scouffaire, P., Rolon, C., Stepowski, D., Cessou, A., and Colin, P. (1998). Experimental investigation of shear coaxial cryogenic jet flames. *J. Prop. Power* , 14(5).
- [Candel et al., 2006] Candel, S., Juniper, M., Singla, G., Scouffaire, P., and Rolon, C. (2006). Structure and dynamics of cryogenic flames at supercritical pressure. *Combust. Sci. Tech.* , 178.
- [Candel and Poinso, 1990] Candel, S. M. and Poinso, T. (1990). Flame stretch and the balance equation for the flame surface area. *Combust. Sci. Tech.* , 70 :1–15.
- [Capdevila,] Capdevila, D. site internet : <http://www.capcomespace.net/>.
- [Carreau et al., 1997] Carreau, J., Porcheron, E., Le Visage, D., Provost, L., and Roger, F. (1997). Liquid core characterisation of coaxial liquid oxygen/inerte gas jets. In *7th ICLASS*.
- [CERFACS, 2009] CERFACS (2009). *AVBP Handbook* - http://cerfacs.fr/~avbp/AVBP_V5.X/HANDBOOK. CERFACS.
- [Cessou et al., 1998] Cessou, A., Colin, P., and Stepowski, D. (1998). Statistical investigation of the turbulent flame geometrical structures in a liquid oxygen/gaseous hydrogen shear coaxial jet. *Proc. Combust. Inst.* , 27 :1039–1046.
- [Charlette et al., 2002] Charlette, F., Veynante, D., and Meneveau, C. (2002). A power-law wrinkling model for LES of premixed turbulent combustion : Part I - non-dynamic formulation and initial tests. *Combust. Flame* , 131 :159–180.
- [CNES, 2001] CNES (2001). Combustion dans les moteurs fusées. Technical report, CNES/ONERA/SNECMA/CNRS.
- [Colin et al., 2000] Colin, O., Ducros, F., Veynante, D., and Poinso, T. (2000). A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Phys. Fluids* , 12(7) :1843–1863.
- [Cook and Riley, 1996] Cook, A. and Riley, J. (1996). Direct numerical simulation of a turbulent reactive plume on a parallel computer. *J. Comput. Phys.* .
- [Cuenot et al., 2000] Cuenot, B., Egolfopoulos, F., and Poinso, T. (2000). An unsteady laminar flamelet model for non premixed combustion. *Combustion Theory and Modelling*, 4 :77–97.

LISTE DES RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [Cuenot and Poinso, 1994] Cuenot, B. and Poinso, T. (1994). Effects of curvature and unsteadiness in diffusion flames. implications for turbulent diffusion flames. *Proc. Combust. Inst.* , 25 :1383–1390.
- [Cuenot and Poinso, 1996] Cuenot, B. and Poinso, T. (1996). Asymptotic and numerical study of diffusion flames with variable lewis number and finite rate chemistry. *Combust. Flame* , 104 :111–137.
- [Dabireau, 2002] Dabireau, F. (2002). *Étude des transferts de chaleur aux parois dans les moteurs-fusées*. Phd thesis, INP Toulouse.
- [Dauplain, 2006] Dauplain, A. (2006). *Allumage des moteurs fusée cryotechniques*. PhD thesis, INPT.
- [Davidson, 2014] Davidson, L. (2014). Fluid mechanics, turbulent flow and turbulence modeling. In *Applied Mechanics course at Chalmers*.
- [De Rosa et al., 2006] De Rosa, M., Sender, J., Zimmermann, H., and Oswald, M. (2006). Cryogenic spray ignition at high altitude conditions. In *42nd AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit*.
- [Deshpande et al., 1997] Deshpande, M., Venkateswaran, S., Foust, M., and Merkle, C. (1997). Finite splitter plate effects on flame holding in a confined hydrogen-oxygen shear layer. In *35th Aerospace Sciences Meeting & Exhibit January 6-10, 1997 / Reno, NV*.
- [Domingo et al., 2002] Domingo, P., Vervisch, L., and Bray, K. N. C. (2002). Modeling partially premixed flamelets in large eddy simulation. *Comb. Th. Mod.* , 6 :529–551.
- [Ducros et al., 1998] Ducros, F., Nicoud, F., and Poinso, T. (1998). Wall-adapating local eddy-viscosity models for simulations in complex geometries. In *ICFD*, pages 293–300. Baines M. J.
- [Echehki and Ferziger, 1993] Echehki, T. and Ferziger, J. (1993). A simplified reaction rate model and its application to the analysis of premixed flames. *Combust. Sci. Tech.* , 89 :293–351.
- [Faeth, 1990] Faeth, G. M. (1990). Structure and atomization properties of dense turbulent sprays. In *23rd Symp. (Int.) on Combustion*, volume 23, pages 1345–1352.
- [Février et al., 2005] Février, P., Simonin, O., and Squires, K. (2005). Partitioning of particle velocities in gas-solid turbulent flows into a continuous field and a spatially uncorrelated random distribution : Theoretical formalism and numerical study. *J. Fluid Mech.* , 533 :1–46.
- [Fiorina et al., 2005] Fiorina, B., Gicquel, O., Vervisch, L., Carpentier, S., and Darabiha, N. (2005). Approximating the chemical structure of partially-premixed and diffusion counter-flow flames using FPI flamelet tabulation. *Combust. Flame* , 140 :147–160.
- [Franzelli, 2011] Franzelli, B. (2011). *Impact of the chemical description on the numerical simulations and large eddy simulations of turbulent combustion in industrial aero-engines*. PhD thesis, INP Toulouse.

- [Frey et al., 2010] Frey, M., Aichner, T., Görgen, J., Ivancic, B., Kniesner, B., and Knab, O. (2010). Modeling of rocket combustion devices. In 2010-4329, A., editor, *10th AIAA/ASME Joint Thermophysics and Heat Transfer Conference*.
- [Georjon and Reitz, 1999] Georjon, T. and Reitz, R. (1999). A drop shattering collision model for multidimensional spray computations. In *Atomization and Sprays*, pages 231–254.
- [Germano et al., 1991] Germano, M., Piomelli, U., Moin, P., and Cabot, W. (1991). A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Phys. Fluids*, 3(7) :1760–1765.
- [Gilbert et al., 1983] Gilbert, R. G., Luther, K., and Troe, J. (1983). Theory of thermal unimolecular reactions in the fall-off range. ii. weak collisions rate constants. *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.*, 87 :169–177.
- [Goodwin,] Goodwin. Cantera code : <http://code.google.com/p/cantera/>.
- [Gurliat et al., 2003] Gurliat, O., Schmidt, V., Haidn, O., and Oschwald, M. (2003). Ignition of cryogenic h₂/lox sprays. *Aero. Sci. Tech.*.
- [Hagemann et al., 2002] Hagemann, G., Alting, J., Kretschmer, J., Terhardt, M., Frey, M., Ryden, R., and Stark, R. (2002). The calorimeter nozzle programme. In 2002-3998, A., editor, *38th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*.
- [Hagemann et al., 2003] Hagemann, G., Preuss, A., Grauer, F., Kretschmer, J., Frey, M., Ryden, R., Stark, R., and Zerjeski, D. (2003). Technology investigation for high area ratio nozzle concepts. In 2003-4912, A., editor, *39TH AIAA/ASME/SAE/ASEE JOINT PROPULSION CONFERENCE AND EXHIBIT*.
- [Haidn, 2007] Haidn, O. (2007). Advanced rocket engines. In *Advances on Propulsion Technology for High-Speed Aircraft*, pages 6–1 – 6–40. NATO Science and Technology Organization.
- [Haidn and Habiballah, 2003] Haidn, O. and Habiballah, M. (2003). Research on high pressure cryogenic combustion. *Aero. Sci. Tech.*, 7 :473–491.
- [Herding, 1997] Herding, G. (1997). *Analyse expérimentale de la combustion d'ergols cryogéniques*. PhD thesis, Ecole Centrale de Paris.
- [Herding et al., 1998] Herding, G., Snyder, R., Rolon, C., and Candel, S. (1998). Investigation of cryogenic propellant flames using computerized tomography of emission images. *J. Prop. Power*, 14(2).
- [Herding et al., 1995] Herding, G., Snyder, R., Scoufflaire, P., Rolon, C., and Candel, S. (1995). Emission and laser induced fluorescence imaging of cryogenic propellant combustion. In *Conference on Propulsive Flows in Space Transportation Systems, Bordeaux, France*, pages 1–15.
- [Herding et al., 1996] Herding, G., Snyder, R., Scoufflaire, P., Rolon, C., and Candel, S. (1996). Flame stabilization in cryogenic combustion. In *26th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 2041–2047.
- [Hirschfelder et al., 1954] Hirschfelder, J., Curtis, C., and Bird, B. (1954). *Molecular Theory of Gases and Liquids*. John Wiley & Sons, 1954 edition.

LISTE DES RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [Hong et al., 2001] Hong, M., Cartellier, A., and Hopfinger, E. (2001). Caractérisation de l'atomisation par sonde à fibre optique : sonde grenobloise. Technical report, Rapport de Contrat GDR/SNECMA.
- [Hong et al., 2000] Hong, M., Cartellier, A., and Hopfinger, E. J. (2000). Spray characterization using optical probes : Feasability of drop velocity, size and concentration measurements. In *Proceeding of Second Japanese-European Two-Phase Flow Group Meeting*.
- [Hopfinger and Lasheras, 1996] Hopfinger, E. and Lasheras, J. (1996). Explosive breakup of a liquid jet by a swirling coaxial gas jet. *Phys. Fluids*, pages 1696–1698.
- [Hopfinger, 1998] Hopfinger, E. J. (1998). Liquid jet instability and atomization in a coaxial gas stream. In *Advances in Turbulence VII FLUID MECHANICS AND ITS APPLICATIONS*, volume 46, pages 69–78.
- [Hopfinger, 2001] Hopfinger, E. J. (2001). Atomisation d'un jet liquide par un jet de gaz coaxial : Bilan des connaissances acquises. In *Combustion dans les moteurs fusées*, pages 34–47.
- [Ihme, 2007] Ihme, M. (2007). *Pollutant formation and noise emission in turbulent non-premixed flames*. PhD thesis, Stanford University.
- [Ihme et al., 2005] Ihme, M., Chong, M., and Pitsch, H. (2005). Prediction of local extinction and re-ignition effects in non-premixed turbulent combustion using a flamelet/progress variable approach. *Proc. Combust. Inst.*, 30 :793–800.
- [Izard, 2009] Izard, J. (2009). *Contribution à la modélisation de la combustion non-prémélangée turbulente dans les écoulements rapides*. PhD thesis, ENSMA.
- [Izard and Mura, 2009] Izard, J. and Mura, A. (2009). Stabilization of non-premixed flames in supersonic reactive flows. In Mécanique, C., editor, *Combustion for aerospace propulsion*, volume 337, pages 362–372.
- [Jacquin and Tabeling, 2006] Jacquin, L. and Tabeling, P. (2006). Turbulence et tourbillons. In *Cours de Dynamique des Fluides de l'école Polytechnique*.
- [Juniper, 2001] Juniper, M. (2001). *Structure et stabilisation des flammes cryotechniques*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris.
- [Juniper and Candel, 2003a] Juniper, M. and Candel, S. (2003a). Edge diffusion flame stabilization behind a step over a liquid reactant. *J. Prop. Power*, 19(3).
- [Juniper and Candel, 2003b] Juniper, M. and Candel, S. (2003b). The effect of damköhler number on the stand-off distance of cross-flow flame. *Combustion Theory and Modelling*, 7 :563–577.
- [Juniper and Candel, 2003c] Juniper, M. and Candel, S. (2003c). The stability of ducted compound flows and consequences for the geometry of coaxial injectors. *J. Fluid Mech.*, 482 :257–269.
- [Juniper et al., 2001a] Juniper, M., Trichet, P., Scoufflaire, P., Rolon, C., and Candel, S. (2001a). Stabilisation des flammes cryotechniques et effets du retrait. In *Combustion dans les moteurs fusées*, pages 221–231.

- [Juniper et al., 2001b] Juniper, M., Trichet, P., Scouflaire, P., Rolon, C., and Candel, S. (2001b). Structure des flammes cryotechniques à pression subcritique et supercritique. In *Combustion dans les moteurs fusées*.
- [Juniper et al., 2000] Juniper, M., Tripathi, A., Scouflaire, P., Rolon, C., and Candel, S. (2000). Structure of cryogenic flames at elevated pressures. *Proc. Combust. Inst.* , 28 :1103–1109.
- [Kaufmann, 2004] Kaufmann, A. (2004). *Vers la simulation des grandes échelles en formulation Euler/Euler des écoulements réactifs diphasiques*. Phd thesis, INP Toulouse.
- [Kee et al., 1986] Kee, R. J., Dixon-Lewis, G., Warnatz, J., E., C. M., and Miller, J. A. (1986). A fortran computer code package for the evaluation of gas phase, multicomponent transport properties. Technical Report SAND86-8246, Sandia National Laboratories.
- [Kendrick et al., 1998] Kendrick, D., Herding, G., Scouflaire, P., Rolon, C., and Candel, S. (1998). Effet du retrait sur la stabilisation des flammes cryotechniques. In *Comptes rendus de l'Académie de Sciences, Serie II b*, volume 326, pages 111–116.
- [Kendrick et al., 1999] Kendrick, D., Herding, G., Scouflaire, P., Rolon, C., and Candel, S. (1999). Effects of a recess on cryogenic flame stabilization. *Combust. Flame* , 118 :327–339.
- [Kim and Moin, 2011] Kim, D. and Moin, P. (2011). Numerical simulation of the breakup of a round liquid jet by a coaxial flow of gas with a subgrid lagrangian breakup model. In for Turbulence Research, C., editor, *Annual Research Briefs*.
- [Knudsen and Pitsch, 2009] Knudsen, E. and Pitsch, H. (2009). A general flamelet transformation useful for distinguishing between premixed and non-premixed modes of combustion. *Combust. Flame* , (156) :678–696.
- [Kolmogorov, 1941] Kolmogorov, A. N. (1941). The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large reynolds numbers. *C. R. Acad. Sci. , USSR*, 30 :301.
- [Kraichnan, 1967] Kraichnan, R. (1967). Inertial ranges in two-dimensional turbulence. *Phys. Fluids* , 10 :1417–1423.
- [Krebs,] Krebs, G. site internet : <http://space.skyrocket.de/>.
- [Kuo, 2005] Kuo, K. K. (2005 Second Edition). *Principles of combustion*. John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey.
- [Lacaze, 2009] Lacaze, G. (2009). *Simulation aux Grandes Echelles de l'allumage de moteurs fusées cryotechniques*. Phd thesis, INP Toulouse.
- [Lacaze et al., 2009] Lacaze, G., Cuenot, B., Poinot, T. J., and Oswald, M. (2009). Large eddy simulation of laser ignition and compressible reacting flow in a rocket-like configuration. *Combust. Flame* , 156(6) :1166–1180.
- [Larsson, 2012] Larsson, E. (2012). Simulation of flow and combustion in h₂/o₂ rocket thrust chambers using a 2d spray combustion method. Master's thesis, Chalmers University of Technology. Göteborg.

LISTE DES RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [Lasheras et al., 1998] Lasheras, J., Villiermaux, E., and Hopfinger, E. J. (1998). Break-up and atomization of a round water jet by a high-speed annular air jet. *J. Fluid Mech.*, 357 :351–379.
- [Lasheras and Hopfinger, 2000] Lasheras, J. C. and Hopfinger, E. J. (2000). Liquid jet instability and atomisation in a coaxial gas stream. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 32 :275–308.
- [Lee, 1994] Lee, Y. (1994). *Nonpremixed reacting flows near extinction*. PhD thesis, Cornell Univ.
- [Légier et al., 2000] Légier, J.-P., Poinot, T., and Veynante, D. (2000). Dynamically thickened flame LES model for premixed and non-premixed turbulent combustion. In *Proc. of the Summer Program*, pages 157–168. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ.
- [Légier et al., 2002] Légier, J.-P., Varoquié, B., Lacas, F., Poinot, T., and Veynante, D. (2002). Large eddy simulation of a non-premixed turbulent burner using a dynamically thickened flame model. In Eds, A. P. and Candel, S., editors, *IUTAM Symposium on Turbulent Mixing and Combustion*, pages 315 – 326. Kluwer Academic Publishers.
- [Leith, 1968] Leith, C. (1968). Diffusion approximation for two-dimensional turbulence. *Phys. Fluids*, 11 :671–673.
- [LeRoy, 1988] LeRoy, P. (1988). *Cascade inverse et dispersion turbulente en turbulence bidimensionnelle*. PhD thesis, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées.
- [Libby and Williams, 1994] Libby, P. A. and Williams, F. A. (1994). Turbulent combustion : fundamental aspects and a review. In *Turbulent Reacting Flows*, pages 2–61. Academic Press London.
- [Linan, 1974] Linan, A. (1974). The asymptotic structure of counterflow diffusion flames for large activation energies. *Acta Astronautica*, 1 :1007.
- [Linan and Crespo, 1976] Linan, A. and Crespo, A. (1976). An asymptotic analysis of unsteady diffusion flames for large activation energies. *Combust. Sci. Tech.*, 14 :95–117.
- [Marinov et al., 1996] Marinov, N., Westbrook, C., and Pitz, W. (1996). Detailed and global chemical kinetics model for hydrogen. *Transport Phenomena in combustion*, 92.
- [Marmottant, 2001] Marmottant, P. (2001). *Atomisation d'un liquide par un courant gazeux*. PhD thesis, INP Grenoble.
- [Marmottant and Villiermaux, 2000] Marmottant, P. and Villiermaux, E. (2000). Mécanisme d'atomisation primaire dans les jets coaxiaux. Technical report, Rapport de fin de contrat SEP N°910023.
- [Marmottant and Villiermaux, 2004] Marmottant, P. and Villiermaux, E. (2004). On spray formation. *J. Fluid Mech.*, 498 :73–111.
- [Masquelet et al., 2008] Masquelet, M., Menon, S., Jin, Y., and Friedrich, R. (2008). Simulation of unsteady combustion in a lox-gh2 fueled rocket engine. *Aero. Sci. Tech.*, 13 :466–474.
- [Matalon and Matkowsky, 1982] Matalon, M. and Matkowsky, B. J. (1982). Flames as gasdynamic discontinuities. *J. Fluid Mech.*, 124 :239.

- [Mayer, 1961] Mayer (1961). Theory of liquid atomization in high velocity gas streams. *ARS Journal*, 31(12) :1783–1785.
- [Mayer et al., 2001] Mayer, W., Ivancic, B., Schik, A., and Hornung, U. (2001). Propellant atomization and ignition phenomena in liquid oxygen/gaseous hydrogen rocket combustors. *J. Prop. Power*, 17(4).
- [Mayer et al., 1998] Mayer, W., Snick, A., Vielle, B., Chauveau, C., Gökalp, I., Talley, D., and Woodward, R. (1998). Atomization and breakup of cryogenic propellants under high-pressure subcritical and supercritical conditions. *J. Prop. Power*, 14 :835–842.
- [Mayer and Tamura, 1996] Mayer, W. and Tamura, H. (1996). Propellant injection in a liquid oxygen/gaseous hydrogen rocket engine. *J. Prop. Power*, 12(6).
- [McManus et al., 1993] McManus, K. R., Aguerre, F., Yip, B., and Candel, S. (1993). Analysis of the ignition sequence of a multiple injector combustor using plif imaging. *Non-Intrusive Combustion Diagnostics*, 714-725.
- [Meneveau and Poinso, 1991] Meneveau, C. and Poinso, T. (1991). Stretching and quenching of flamelets in premixed turbulent combustion. *Combust. Flame*, 86 :311–332.
- [Moin et al., 1991] Moin, P., Squires, K. D., Cabot, W., and Lee, S. (1991). A dynamic subgrid-scale model for compressible turbulence and scalar transport. *Phys. Fluids*, A 3(11) :2746–2757.
- [Moreau, 2006] Moreau, M. (2006). *Modélisation numérique directe et des grandes échelles des écoulements turbulents gaz-particules dans le formalisme eulérien mésoscopique*. Phd thesis, INP Toulouse.
- [Moreau et al., 2005] Moreau, M., Bédard, B., and Simonin, O. (2005). A priori testing of subgrid stress models for euler-euler two-phase LES from euler-lagrange simulations of gas-particle turbulent flow. In *18th Ann. Conf. on Liquid Atomization and Spray Systems*. ILASS Americas.
- [Moureau et al., 2011] Moureau, V., Domingo, P., and Vervisch, L. (2011). From large-eddy simulation to direct numerical simulation of a lean premixed swirl flame : Filtered laminar flame-pdf modeling. *Combust. Flame*, 158(7) :1340–1357.
- [(NASA), 2000] (NASA), A. A. S. (2000). *Challenge To Apollo : The Soviet Union and The Space Race, 1945-1974*. University Press of Florida.
- [Nicoud et al., 2011] Nicoud, F., Toda, H., Cabrit, O., Bose, S., and Lee, J. (2011). Using singular values to build a subgrid-scale model for large eddy simulations. *Phys. Fluids*, 23(8).
- [NIST, 1998] NIST (1998). *NIST-JANAF Thermochemical Tables*. National Institute of Standards and Technology.
- [Obounou et al., 1994] Obounou, M., Gonzales, M., and Borghi, R. (1994). A lagrangian model for predicting turbulent diffusion flames with chemical kinetic effects. *Proc. Combust. Inst.*.
- [Oefelein, 2002] Oefelein, J. (2002). Large eddy simulation of cryogenic injection processes at supercritical pressure. In *National Aeronautics and Space Administration*.

LISTE DES RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [Oefelein, 2005] Oefelein, J. (2005). Thermophysical characteristics of shear-coaxial lox-h₂ flames at supercritical pressure. *Proc. Combust. Inst.* , 30(2) :2929–2937.
- [Oefelein and Yang, 1998] Oefelein, J. and Yang, V. (1998). Modeling high-pressure mixing and combustion processes in liquid rocket engines. *J. Prop. Power* , 14(5).
- [Organisation,] Organisation, I. S. R. site internet : <http://www.isro.org/>.
- [Peters, 1991] Peters, N. (1991). Length scales in laminar and turbulent flames. Technical report, AIAA.
- [Petrova and Williams, 2006] Petrova, M. and Williams, F. A. (2006). A small detailed chemical-kinetic mechanism for hydrocarbon combustion. *Combust. Flame* , (144) :526–544.
- [Philippe,] Philippe, V. site internet : <http://lanceurs.destination-orbite.net/>.
- [Pierce, 2001] Pierce, C. (2001). *Progress-variable approach for large eddy simulation of turbulent combustion*. PhD thesis, Stanford University.
- [Pierce and Moin, 2004] Pierce, C. D. and Moin, P. (2004). Progress-variable approach for large eddy simulation of non-premixed turbulent combustion. *J. Fluid Mech.* , 504 :73–97.
- [Pilch and Erdman, 1987] Pilch, M. and Erdman, C. A. (1987). Use of breakup time data and velocity history data to predict the maximum size of stable fragments for acceleration-induced breakup of a liquid drop. *Int. J. Multiphase Flow* , 13(6) :741–757.
- [Pitsch and Peters, 1998] Pitsch, H. and Peters, N. (1998). A consistent flamelet formulation for non-premixed combustion considering differential diffusion effects. *Combust. Flame* , 114 :26–40.
- [Poinsoot and Veynante, 2001] Poinsoot, T. and Veynante, D. (2001). *Theoretical and Numerical Combustion*. R.T. Edwards.
- [Poinsoot and Veynante, 2005] Poinsoot, T. and Veynante, D. (2005). *Theoretical and Numerical Combustion*. R.T. Edwards, 2nd edition.
- [Poinsoot et al., 1991] Poinsoot, T., Veynante, D., and Candel, S. (1991). Quenching processes and premixed turbulent combustion diagrams. *J. Fluid Mech.* , 228 :561–605.
- [Poinsoot et al., 1990] Poinsoot, T. J., Veynante, D., and Candel, S. (1990). Diagrams of premixed turbulent combustion based on direct simulation. In *23rd Symp. (Int.) on Combustion*, pages 613–619. The Combustion Institute, Pittsburgh.
- [Pons et al., 2008] Pons, L., Darabiha, N., and Candel, S. (2008). Pressure effects on nonpremixed strained flames. *Combust. Flame* , 152 :218–229.
- [Pope, 2000] Pope, S. B. (2000). *Turbulent flows*. Cambridge University Press.
- [Poubeau, 2014] Poubeau, A. (2014). *Thèse en cours*. PhD thesis, INPT.
- [Prelick et al., 1998] Prelick, D., Wiedmann, D., Oechslein, W., and Kretschmer, J. (1998). Cryogenic rocket calorimeter chamber experiments and heat transfer simulations. In *34TH AIAA/ASME/SAE/ASEE JOINT PROPULSION CONFERENCE AND EXHIBIT*.

- [Przekwas, 1996] Przekwas, A. (1996). Theoretical modelling of liquid jet and sheet breakup processes. In *Advances in Spray Combustion : Spray Atomization and Droplet Burning Phenomena. Prog. Astronaut. Aeronaut.*, volume 166, pages 211–239.
- [Quintilla et al., 2001] Quintilla, V., Cazalens, M., Lecourt, M., and Lavergne, G. (2001). Experimental and numerical study to predict spray ignition. In Europe, I., editor, *Proc. of 17th Annual Conference on liquid Atomization and Spray Systems*.
- [Raynal, 1997] Raynal, L. (1997). *Instabilité et entrainement à l'interface d'une couche de mélange Liquide-Gaz*. PhD thesis, Université d'Joseph Fourier, Grenoble.
- [Rehab et al., 1997] Rehab, H., Villermaux, E., and Hopfinger, E. (1997). Flow regimes of large velocity ratio coaxial jets. *J. Fluid Mech.* .
- [Research and Center,] Research, K. S. and Center, P. S. site internet : <http://www.khrunichev.ru/>.
- [Réveillon and Vervisch, 2005] Réveillon, J. and Vervisch, L. (2005). Analysis of weakly turbulent diluted-spray flames and spray combustion regimes. *J. Fluid Mech.* , 537 :317–347.
- [Riber et al., 2005] Riber, E., Moreau, M., Simonin, O., and Cuenot, B. (2005). Towards large eddy simulation of non-homogeneous particle laden turbulent gas flows using euler-euler approach. In *11th Workshop on Two-Phase Flow Predictions*, Merseburg, Germany.
- [Ribert et al., 2008] Ribert, G., Zong, N., Yang, V., Pons, L., Darabiha, N., and Candel, S. (2008). Counterflow diffusion flames of general fluids : Oxygen/hydrogen mixtures. *Combust. Flame* , 154 :319–330.
- [Richardson, 1922] Richardson, L. F. (1922). *Weather Prediction by Numerical Process*. Cambridge University Press, cambridge edition.
- [Roberts et al., 1993] Roberts, W. L., Driscoll, J. F., Drake, M. C., and Goss, L. P. (1993). Images of the quenching of a flame by a vortex : to quantify regimes of turbulent combustion. *Combust. Flame* , 94 :58–69.
- [Ruiz, 2012] Ruiz, A. (2012). *Unsteady Numerical Simulations of Transcritical Turbulent Combustion in Liquid Rocket Engines*. PhD thesis, INP Toulouse.
- [Ruiz and Selle, 2011] Ruiz, A. and Selle, L. (2011). Simulation of a turbulent supercritical hydrogen/oxygen flow behind a splitter plate : cold flow and flame stabilization. In *7th Mediterranean Combustion Symposium*. Seventh Mediterranean Combustion Symposium.
- [Saxena and Williams, 2006] Saxena, P. and Williams, F. A. (2006). Testing a small detailed chemical-kinetic mechanism for the combustion of hydrogen and carbon monoxide. *Combust. Flame* , 145(1-2) :316–323.
- [Schmidt et al., 2003] Schmidt, V., Klimenko, D., Haidn, O., Oschwald, M., Nicole, A., Ordonneau, G., and Habiballah, M. (2003). Experimental investigation and modelling of the ignition transient of a coaxial h₂/o₂-injector. In *5th International Symposium on Liquid Rocket Propulsion*.

LISTE DES RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [Schmidt et al., 2001] Schmidt, V., Sender, J., and Oschwald, M. (2001). Simultaneous observation of liquid phase distribution and flame front evolution during the ignition transient of a lox/gh₂-combustor. *Journal of Visualization*, 4(4) :365–372.
- [Schmidt et al., 2004] Schmidt, V., Wepler, U., Haidn, O., and Oschwald, M. (2004). Characterization of the primary ignition process of a coaxial gh₂/lox spray. In *42nd AIAA Aerospace Science Meeting and Exhibit*.
- [Schmitt et al., 2007] Schmitt, P., Poinso, T., Schuermans, B., and Geigle, K. P. (2007). Large-eddy simulation and experimental study of heat transfer, nitric oxide emissions and combustion instability in a swirled turbulent high-pressure burner. *J. Fluid Mech.*, 570 :17–46.
- [Schmitt, 2009] Schmitt, T. (2009). *Simulation des grandes échelles de la combustion turbulente en régime supercritique*. PhD thesis, Université de Toulouse - Ecole doctorale MEGeP, CERFACS - CFD Team, Toulouse.
- [Schmitt et al., 2011] Schmitt, T., Méry, Y., Boileau, M., and Candel, S. (2011). Large-eddy simulation of methane/oxygen flame under transcritical conditions. *Proc. Combust. Inst.*, 33.
- [Schmitt et al., 2010] Schmitt, T., Selle, L., Ruiz, A., and Cuenot, B. (2010). Large-eddy simulation of supercritical-pressure round jets. *AIAA Journal*, 48(9) :2133–2144.
- [Sengissen et al., 2007] Sengissen, A., Giauque, A., Staffellbach, G., Porta, M., Krebs, W., Kaufmann, P., and Poinso, T. (2007). Large eddy simulation of piloting effects on turbulent swirling flames. *Proc. Combust. Inst.*, 31 :1729–1736.
- [Seshadri, 1996] Seshadri, K. (1996). Multistep asymptotic analyses of flame structures (plenary lecture). *Proc. Combust. Inst.*, 26 :831–846.
- [Seshadri and Peters, 1988] Seshadri, K. and Peters, N. (1988). Asymptotic structure and extinction of methane-air diffusion flames. *Combust. Flame*, 73 :23–44.
- [Seshadri et al., 1994] Seshadri, K., Peters, N., and Williams, F. A. (1994). Asymptotic analyses of stoichiometric and lean hydrogen-air flames. *Combust. Flame*, 96(4) :407–427.
- [Shumkivan, 2017] Shumkivan, F. (2017). *Thèse en cours*. PhD thesis, INPT.
- [Simonin, 1996] Simonin, O. (1996). Combustion and turbulence in two phase flows. Lecture Series 1996-02, Von Karman Institute for Fluid Dynamics.
- [Simonin et al., 2002] Simonin, O., Février, P., and Lavieville, J. (2002). On the spatial distribution of heavy particle velocities in turbulent flow : from continuous field to particulate chaos. *J. Turb.*, 3.
- [Singla et al., 2005] Singla, G., Scoufflaire, P., Rolon, C., and Candel, S. (2005). Transcritical oxygen/transcritical or supercritical methane combustion. *Proc. Combust. Inst.*, 30 :2921–2928.
- [Singla et al., 2006] Singla, G., Scoufflaire, P., Rolon, C., and Candel, S. (2006). Planar laser-induced fluorescence of oh in high-pressure cryogenic lox/gh₂ jet flames. *Combust. Flame*, 144 :151–169.

- [Singla et al., 2007] Singla, G., Scoufflaire, P., Rolon, J. C., and Candel, S. (2007). Flame stabilization in high pressure lox/ gh_2 and gch_4 combustion. *Proc. Combust. Inst.* , 31 :2215–2222.
- [Smagorinsky, 1963] Smagorinsky, J. (1963). General circulation experiments with the primitive equations : 1. the basic experiment. *Mon. Weather Rev.* , 91 :99–164.
- [Smith, 2007] Smith, J. (2007). *High pressure LOx/H2 rocket engine combustion*. PhD thesis, University of Adelaide, School of Mechanical Engineering.
- [Smith et al., 2007] Smith, J., Sneider, G., Suslov, D., Oschwald, M., and Haidn, O. (2007). Steady state high pressure lox/h2 rocket engine combustion. *Aero. Sci. Tech.* , 11 :39–47.
- [SNECMA,] SNECMA. site internet : <http://www.snecma.com/>.
- [Snyder et al., 1997] Snyder, R., Herding, G., Rolon, J. C., and Candel, S. (1997). Analysis of flame patterns in cryogenic propellant combustion. *Combust. Sci. Tech.* , 124(331-370).
- [SpaceX,] SpaceX. site internet : <http://www.spacex.com/>.
- [STARSEM,] STARSEM. site internet : <http://www.starsem.com/>.
- [Stepowski et al., 1994] Stepowski, D., Cessou, A., and Goix, P. (1994). Flame stabilization and oh fluorescence mapping of the combustion structures in the near field of a spray jet. *Combust. Flame* , 99(3/4) :516–522.
- [Thevenin et al., 2000] Thevenin, D., Renard, P. H., Fiechtner, G., Gord, J., and Rolon, J. C. (2000). Regimes of nonpremixed flame/vortex interaction. In *28th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 2101–2108. The Combustion Institute, Pittsburgh.
- [Tripathi et al., 1999] Tripathi, A., Juniper, M., Scoufflaire, P., Rolon, C., Durox, D., and Candel, S. (1999). Lox tube recess in cryogenic flames investigated using oh and h_2o emission. *AIAA Paper 99-2490*.
- [Vallet et al., 2001] Vallet, A., Burluka, A. A., and Borghi, R. (2001). Development of a Eulerian model for the atomization of a liquid jet. *Atomization and Sprays* , 11(6) :619–642.
- [van Kalmthout, 1996] van Kalmthout, E. (1996). *Stabilisation et modelisation des flammes turbulentes non premelangees. Etude theorique et simulations directes*. PhD thesis, Ecole Centrale de Paris.
- [Vervisch and Poinso, 1998] Vervisch, L. and Poinso, T. (1998). Direct numerical simulation of non premixed turbulent flames. *Ann. Rev. Fluid Mech.* , 30 :655–692.
- [Veynante and Poinso, 1997] Veynante, D. and Poinso, T. (1997). Large eddy simulation of combustion instabilities in turbulent premixed burners. In *Annual Research Briefs* , pages 253–274. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ.
- [Veynante and Vervisch, 2002] Veynante, D. and Vervisch, L. (2002). Turbulent combustion modeling. *Prog. Energy Comb. Sci.* , 28 :193 – 266.
- [Veynante and Vervisch, 2004] Veynante, D. and Vervisch, L. (2004). Turbulent combustion modeling. In *Lectures Series Von Karmann Institute*.

LISTE DES RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [Villiermaux, 1998] Villiermaux, E. (1998). Mixing and spray formation in coaxial jets. *J. Prop. Power*, 14(5) :807–817.
- [Wikipedia,] Wikipedia. site internet : <http://www.wikipedia.fr/>.
- [Wilke, 1950] Wilke, C. (1950). A viscosity equation for gas mixture. *The Journal of Chemical Physics*.
- [Williams, 1985] Williams, F. A. (1985). *Combustion Theory*. Benjamin Cummings, Menlo Park, CA.
- [Williams, 2008] Williams, F. A. (2008). Detailed and reduced chemistry for hydrogen autoignition. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 21(2) :131–135.
- [Yamashita et al., 1996] Yamashita, H., Shimada, M., and Takeno, T. (1996). A numerical study on flame stability at the transition point of jet diffusion flame. In *26th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 27 – 34. The Combustion Institute, Pittsburgh.
- [Yoshizawa, 1986] Yoshizawa, A. (1986). Statistical theory for compressible turbulent shear flows, with the application to subgrid modeling. *Phys. Fluids*, 29(7) :2152–2164.
- [Zeldovich and Frank-Kamenetskii, 1938] Zeldovich, Y. B. and Frank-Kamenetskii, D. A. (1938). Theory of the thermal flame propagation. *ZELDOVICH*, 12(1) :100–105.

Annexes

Conditions limites pour l'injection gazeuse

A.1 Introduction

Les calculs de chambre présentés dans la suite de cette étude nécessitent l'utilisation de conditions aux limites complexes. On rappelle ici les relations permettant de définir les conditions aux limites pour la phase gazeuse.

A.2 Conditions d'injection gazeuse

En utilisant les données de réservoir, on définit les conditions limites d'injection. Pour identifier le régime d'écoulement, on compare le système d'injection à une tuyère. Les quantités "totales" représentent les quantités dans les dômes d'injection et le col de la tuyère représente la section de l'injecteur à l'entrée de la chambre. La méthode permettant de connaître la condition à imposer en entrée consiste à supposer que l'écoulement est isentropique (Eq.(A.1), Eq.(A.2) et Eq.eqA.3) :

$$\frac{P_{tot}}{P} = \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2\right)^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}} \quad (A.1)$$

$$\frac{T_{tot}}{T} = 1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2 = \left(\frac{P_{tot}}{P} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} \quad (\text{A.2})$$

$$\frac{\rho_{tot}}{\rho} = \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2 \right)^{\frac{1}{\gamma-1}} = \left(\frac{P_{tot}}{P} \right)^{\frac{1}{\gamma}} \quad (\text{A.3})$$

On complète ces équations par la relation de gaz parfait et le nombre de Mach où $r = R/W$ avec $R = 8,314 \text{ J/K.mol}$ la constant des gaz parfait et W la masse molaire du fluide :

$$M = \frac{u}{c} \quad (\text{A.4})$$

$$c = \sqrt{\gamma r T} \quad (\text{A.5})$$

Lorsque l'écoulement dans la tuyère est subsonique, les relations isentropiques sont vérifiées. La pression à l'injection P_{inj} est égale à la pression en aval du système P_c . Cependant, lorsque l'écoulement devient supersonique, l'écoulement du système n'est plus isentropique. Cette limite est atteinte lorsque $M = 1$ au col de la tuyère. En aval du col, ces relations ne sont plus valable, mais reste valable en amont. Il est donc possible de déduire la pression d'injection à imposer pour la condition limite. Pour les cas supersonique, on déduit de Eq. A.1 un domaine de non-validité des relations isentropiques :

$$supersonique \iff \frac{P_c}{P_{tot}} \leq \left(\frac{2}{\gamma + 1} \right)^{\gamma/(\gamma-1)} \quad (\text{A.6})$$

Selon le régime de l'écoulement au col, on distingue 2 manières d'établir les conditions aux limites.

A.2.1 Cas subsonique

Lorsque l'inégalité Eq.(A.6) n'est pas vérifiée, on a $P_c = P_{inj}$. Ceci permet d'en déduire le nombre de Mach à l'injection (Eq. (A.7)) puis la vitesse (Eq. (A.8)).

$$M = \left(\frac{2}{\gamma - 1} \right)^{\frac{1}{2}} \left[\left(\frac{P_{tot}}{P_{inj}} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} - 1 \right] \quad (\text{A.7})$$

$$U_{inj} = M \sqrt{\gamma r T_{tot} \left(\frac{P_{inj}}{P_{tot}} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}}} \quad (\text{A.8})$$

On en déduit le débit d'injection (Eq. (A.9)) avec A la section de l'injection :

$$\dot{m} = A \rho_{inj} U_{inj} = A \frac{P_0}{\sqrt{r T_0}} \left(\frac{P}{P_0} \right)^{1/\gamma} \left[\frac{2\gamma}{\gamma - 1} \left(1 - \left(\frac{P}{P_0} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} \right) \right]^{1/2} \quad (\text{A.9})$$

A.2.2 Cas supersonique

Lorsque l'inégalité Eq.(A.6) est vérifiée, les relations isentropiques ne sont valables que jusqu'au col, donc à l'injection. Connaissant $M = 1$ au col, on en déduit les relations suivantes pour la pression (Eq.A.10), la température (Eq.(A.11)), la densité Eq.(A.10), la vitesse (Eq.(A.13)) et le débit (Eq.(A.14)) :

$$P_{inj} = P_{tot} \left(\frac{2}{\gamma + 1} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} \quad (\text{A.10})$$

$$T_{inj} = T_{tot} \frac{2}{\gamma + 1} \quad (\text{A.11})$$

$$\rho_{inj} = \rho_{tot} \left(\frac{2}{\gamma + 1} \right)^{\frac{1}{\gamma-1}} \quad (\text{A.12})$$

$$U_{inj} = \sqrt{\gamma r T_{tot} \frac{2}{\gamma + 1}} \quad (\text{A.13})$$

$$\dot{m} = AC_{\dot{m}} \sqrt{\frac{\gamma}{r}} \frac{P_0}{\sqrt{T_0}} \left(\frac{2}{\gamma + 1} \right)^{\frac{\gamma+1}{2(\gamma-1)}} \quad (\text{A.14})$$

ANNEXE B

Etude préliminaire de la problématique de l'allumage [CONFIDENTIEL]

ANNEXE C

Etude de l'influence du confinement [CONFIDENTIEL]

ANNEXE D

Séquence d'allumage [CONFIDENTIEL]

**Caractéristiques géométriques de la
configuration étudiée
[CONFIDENTIEL]**

Calcul M8.1 [CONFIDENTIEL]
